

**Anwendung des neu entwickelten 3D
Zeitbereichs-Inversionsalgorithmus IP3DInv für
die Induzierte Polarisation auf Messdaten aus
Krauthausen, Deutschland**

I n a u g u r a l – D i s s e r t a t i o n

zur

Erlangung des Doktorgrades

der Mathematisch–Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Universität zu Köln

vorgelegt von

Hannah Langenbach

aus Köln

Köln, 2017

Gutachter:

Prof. Dr. B. Tezkan
Prof. Dr. J. Saur

Tag der mündlichen Prüfung: 07.07.2017

Kurzzusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird ein neu entwickelter 3D Inversionsalgorithmus für Messdaten der Induzierten Polarisation (IP) im Zeitbereich präsentiert. Die Funktionsweise wird mittels synthetischer Daten und Felddaten aus Krauthausen, Jülich demonstriert.

Aufbauend auf der Zeitabhängigkeit des Widerstands wird ein 3D Zeitbereichs-IP-Modell des Untergrunds ermittelt, welches zusätzlich Aufladbarkeit, Relaxationszeit und Frequenzexponent enthält. Die Potentialdifferenzen jedes Zeitpunkts werden unabhängig voneinander mit einem Gleichstrom-Inversionsalgorithmus, welcher Finite-Differenzen und das Reziprozitätsprinzip zur Berechnung der Sensitivitäten nutzt, invertiert. Anstelle einer Berechnung der Felder im Frequenzbereich und einer anschließenden Transformation, nutzt der Algorithmus eine Näherung, so dass das Vorwärtsproblem direkt im Zeitbereich gelöst werden kann. Die Zeitpunkte können so unabhängig und parallel invertiert werden. Es werden Neumann und Dirichlet Randbedingungen genutzt und das lineare Gleichungssystem mittels der preconditionierten Methode der konjugierten Gradienten gelöst. Es sind mit dem Minimum-Gradient-Support, Occam L_1 und L_2 verschiedene Möglichkeiten der Regularisierung implementiert. Der letzte Zeitpunkt aller Transienten, welcher für einen Einschalter nahe am Gleichstromwiderstand liegt, wird in ein Widerstandsmodell des Untergrunds invertiert. Als Startmodell jedes Zeitpunkts wird das resultierende Widerstandsmodell des Untergrunds des vorherigen Zeitpunkts verwendet. Anschließend werden die zeitabhängigen Widerstände der Modelle aller Zeitpunkte zu einem Transienten für jede Zelle zusammengesetzt und dieser mittels einer Homogenen-Halbraum-IP-Inversion mit einem IP-Modell angepasst.

Im Oktober 2012 wurde in Krauthausen auf neun parallelen Profilen Zeitbereichs-IP mit dem Terrameter LS der Firma ABEM gemessen. Mit einer Gradientenauslage und einem Elektrodenabstand von 2,5 m wurden Transienten mit einer Länge bis zu 6 s aufgezeichnet. Die neu entwickelte Preprocessing-Routine filtert die gemessenen Zeitreihen, zerschneidet sie in die enthaltenen Transienten, stapelt diese und berechnet die Standardabweichung. Die so vorbereiteten Transienten genügen den hohen Qualitätsansprüchen des Inversionsalgorithmus. Das resultierende 3D IP-Modell ist ein stellenweise unterbrochenes 2-Schicht-Modell und hält einem Vergleich mit vorherigen Messungen und der Geologie stand.

Abstract

In this thesis a newly developed 3D inversion algorithm for time-domain Induced Polarisation (IP) data is presented. The efficiency of the algorithm is demonstrated using synthetic data and field data measured in Krauthausen near Jülich.

The calculated 3D time-domain IP model is based on the time-dependence of the resistivity. The IP model considers chargeability, relaxation time and frequency exponent. The electrical field at each time point is inverted independently using a DC inversion code, based on the finite difference method and uses the reciprocity principle for calculating the sensitivity. In time-domain, the exact solution of the IP effect can be realised by calculating the electrical field values in frequency-domain, which are afterwards transformed into the time-domain. In the applied algorithm, an approximate solution is utilised where the forward problem is solved directly in the time-domain. Thereby, every time point is calculated independently from and parallel to each other. Neumann and Dirichlet boundary conditions are used and the linear set of equations is solved by a preconditioned method of conjugate gradients. Three types of regularisation are implemented: minimum gradient support, Occam L_1 and L_2 norm. First, the last time point of all transients is inverted resulting in a resistivity model. The resulting model of the previous time point is used as a starting model for the inversion of all time points. Afterwards, the estimated time-dependent resistivity for each cell is independently fitted using a homogeneous IP model.

In October 2012, 9 parallel time-domain IP profiles were measured in Krauthausen using the Terrameter LS by ABEM. A gradient array with an electrode spacing of 2.5 m was used to measure transients of up to 6 s. For pre-processing, a new routine was developed. After filtering, each time series is cut into transients. These transients are stacked and the standard deviation is calculated for every time point. After pre-processing, the data quality conforms to the high requirements of the inversion algorithm. The inversion of the field data with the newly developed 3D algorithm results in a satisfying 3D IP model for the survey area. A two layer resistivity model is estimated, where the second layer is partly interrupted. In comparison with former measurements and the geology the obtained results are satisfying.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Die Induzierte Polarisation	7
2.1. Modelle zur Beschreibung der Effekte der Induzierten Polarisation . . .	7
2.1.1. Porenstruktur und Mineralgehalt	9
2.1.2. Qualitative Beschreibung durch Ersatzschaltbilder	11
2.2. Messung der Induzierten Polarisation	13
2.2.1. Messgrößen im Zeitbereich	14
2.2.2. Messgrößen im Frequenzbereich	17
2.2.3. Auswertung von IP-Felddaten	18
3. Vorwärtsrechnung in drei Dimensionen	23
3.1. Theorie der verwendeten Vorwärtsrechnung	23
3.1.1. Berechnung des zeitabhängigen Widerstands basierend auf ei-	
nem Frequenzbereichs-Modell	23
3.1.2. Grundgleichung der Gleichstromgeoelektrik	25
3.1.3. Berechnung der Modelle verschiedener Zeitpunkte mittels ei-	
ner Näherung	26
3.1.4. Diskretisierung der partiellen Differentialgleichung	27
3.1.5. Berechnung des synthetischen Transienten einer Sender-	
Empfänger-Kombination	31
3.2. Modellstudien mit <i>For3DIP</i>	33
3.2.1. Homogener Halbraum	33
3.2.2. Blockmodell	38
3.2.3. Diskussion der Modellstudien mit <i>For3DIP</i>	42
4. Inversion der Induzierten Polarisation im Zeitbereich in drei Dimensio-	43
nen	
4.1. Prinzip der Inversion	44
4.2. Grundlagen des verwendeten DC-Inversionsalgorithmus	46
4.2.1. Form der Kostenfunktion und ihre Minimierung mittels der	
Newtonmethode	47

4.2.2.	Berechnung des Modell-Updates und Regularisierung der Kostenfunktion	51
4.3.	Grundlagen des verwendeten IP-Inversionsalgorithmus	53
4.3.1.	Form der Kostenfunktion und ihre Minimierung	53
4.3.2.	Startwerte für Gleichstromwiderstand und Aufladbarkeit	55
4.4.	Modellstudien mit $IP3DInv_{DC}$ und $IP3DInv_{IP}$	57
4.4.1.	Homogener Halbraum	57
4.4.2.	Blockmodell	63
4.4.3.	Diskussion der Modellstudien mit $IP3DInv_{DC}$ und $IP3DInv_{IP}$	72
5.	Inversion von Felddaten aus Krauthausen	73
5.1.	Das Messgebiet: Testfeld des Forschungszentrums Jülich	74
5.1.1.	Geologie des Messgebiets	75
5.1.2.	Informationen aus vorherigen Messungen	77
5.2.	Zeitbereichs-IP-Messung in Krauthausen, Jülich in 2012	81
5.2.1.	Messaufbau und verwendete Geräte	81
5.2.2.	Testmessungen mit dem <i>Terrameter LS</i> in Köln-Longerich	82
5.2.3.	IP-Messung in Krauthausen 2012	84
5.3.	Preprocessing der Messdaten	86
5.3.1.	Ausführung der Preprocessing-Routine <i>filtering</i>	87
5.3.2.	Einzelne Schritte des Preprocessings	88
5.4.	Inversion der Felddaten mit $IP3DInv$	94
5.4.1.	Wahl der Regularisierungsparameter	94
5.4.2.	Inversion des letzten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Startmodellen	100
5.4.3.	DC-Inversion aller Zeitpunkte	102
5.4.4.	IP-Inversion aller Zellen	102
5.5.	Diskussion der Inversionsergebnisse der Felddaten	108
5.5.1.	Vergleich mit Ergebnissen der Inversion mit $RES2DINV$	108
5.5.2.	Vergleich mit anderen Messungen und geologische Interpretation	109
6.	Zusammenfassung und Ausblick	113
	Anhang	116
A.	Variablen	117
B.	Anhang zu Modellstudien mit $IP3DInv_{DC}$ und $IP3DInv_{IP}$ (4.4)	121
C.	Anhang zu IP-Inversion aller Zellen (5.4.4)	125

D. Manual zu <i>For3DIP</i>	133
D.1. Kompilieren und Ausführen	133
D.2. Aufbau des Programms <i>For3DIP.f95</i>	133
D.3. Aufbau der einzelnen Subroutinen	135
D.4. Input- und Output-Dateien	144
D.5. Variablen	149
E. Manual zu <i>IP3DInv_{DC}</i>	153
E.1. Kompilieren und Ausführen	153
E.2. Aufbau des Programms <i>IP3DInv_DC.f95</i>	156
E.3. Aufbau der einzelnen Subroutinen	161
E.4. Input- und Output-Dateien	166
E.5. Variablen	171
F. Manual zu <i>IP3DInv_{IP}</i>	177
F.1. Kompilieren und Ausführen	177
F.2. Aufbau des Programms <i>IP3DInv_IP.f95</i>	178
F.3. Aufbau der einzelnen Subroutinen	179
F.4. Input- und Output-Dateien	186
F.5. Variablen	189

1. Einleitung

Bei der Induzierten Polarisierung (IP) handelt es sich um eine geoelektrische Methode, welche die Zeitabhängigkeit des spezifischen Widerstands der Gesteine berücksichtigt. Neben dem Gleichstromwiderstand können zusätzlich unabhängige elektrische Parameter gemessen werden, so dass eine weitergehende stoffliche und strukturelle Aussage möglich ist (Berkthold et al., 2005). IP-Messungen können im Zeit- oder Frequenzbereich mit den in der Geoelektrik (DC) üblichen Vier-Punkt-Anordnungen durchgeführt werden. Grundsätzlich sind die Frequenzbereichs- und die Zeitbereichs-IP in ihrer Aussagekraft gleichwertig, sofern die Spektren bzw. die Lade- und Abklingkurve vollständig bekannt sind (Telford et al., 1990).

Eine erste Beschreibung des Effekts der Induzierten Polarisierung über die Aufladbarkeit, welche die stoffliche Fähigkeit Energie zu speichern beschreibt, fand bereits 1922 durch die Gebrüder Schlumberger statt (Schlumberger, 1922). Beim Ausschalten des Stroms stellten sie bei einer Vier-Punkt-Widerstandsmessung fest, dass die Spannung nicht instantan auf Null abfiel. Die Spannung fiel zunächst nur auf einen Teil des Betrags ab um dann langsam weiter auf Null abzusinken.

Aufgrund der hohen IP-Effekte bei sulfidischen Lagerstätten, welche schon früh quantitativ ausgewertet werden konnten, wurde die Methode zu Beginn meist nur für Explorationszwecke genutzt. In den 1940igern wurde wahrscheinlich eine erste, eigenständige IP-Messung im Rahmen einer Ölbohrung durchgeführt und im Rahmen von Laboruntersuchungen fand eine quantitative Beschreibung des IP-Effekts statt (Dakhnov, 1959; Cole and Cole, 1941). Im Jahr 1959 wurde von Seigel (1959) eine mathematische Beschreibung des Abklingvorgangs veröffentlicht und Marshall and Madden (1959) untersuchten theoretische und experimentelle Aspekte des IP-Effekts.

Erst mit der Entwicklung empfindlicher Messgeräte konnten auch geringe IP-Effekte aufgezeichnet werden. Der Einsatz der IP als Messmethode, besonders im spektralen Bereich (Guillen and Hertzog, 2004; Gazoty et al., 2012; Kenkel et al., 2012), hat so in den letzten Jahrzehnten im Ingenieur- und Umweltbereich stark zugenommen. Die Anwendung der Induzierten Polarisierung, z.B. zur Detektion von Verunreinigungen im Untergrund, wurde bereits von Vanhala et al. (1992), Weller and Börner (1996), Rühlow et al. (1999) sowie Hönig and Tezkan (2007) beschrie-

ben. Weitere Anwendungsgebiete sind der Nachweis von Störungszonen mit kluftgebundener Mineralisation, die Abgrenzung bindiger (toniger) gegen rollige (sandige/kiesige) Bereiche, die Untersuchungen des Grundwassers, die Unterscheidung niederohmiger salinarer Sickerwässer und toniger Sedimente und der Nachweis von Kohlenwasserstoffkontaminationen (Berkthold et al., 2005).

Ein guter Überblick über die Entwicklung der IP vorallem der Spektralen-Induzierten-Polarisation (SIP) findet sich in Kemna et al. (2012). Hier wird unter anderem auf den signifikanten Fortschritt der Forschung im Bereich der IP in den letzten 15 Jahren und auf die Notwendigkeit von Auswertalgorithmen in drei Dimensionen eingegangen. Die Autoren sehen ein großes Potential der IP-Methoden in der Untersuchung oberflächennaher Untergrundstrukturen und der Charakterisierung von Prozessen z.B. bezüglich deren hydrogeophysikalischen Eigenschaften.

Ein verbessertes Verständnis des spektralen Verhaltens unterschiedlicher Minerale im Frequenzbereich, eine Anpassung durch Cole-Cole-Halbraummodelle mithilfe zusätzlicher Parameter und eine rechenzeitgünstige Methode zur Berechnung von Einschaltantworten komplexer Leitfähigkeiten des Cole-Cole-Modells im Zeitbereich trugen signifikant zur Verbesserung der Auswertung bei (Pelton et al., 1978; Guptasarma, 1982). Mehrdimensionale Inversionsprobleme sind in der Regel unterbestimmt, so dass man Nebenbedingungen zur Stabilisierung einführen muss. 1990 stellten De Groot-Hedlin and Constable (1990) eine Methode zur Occam-Regularisierung von 2D Modellen vor, welche sehr verbreitet ist und stark geglättete Modelle liefert. Daneben wurden auch vollständig andere Regularisierungsansätze eingeführt, die nicht mehr zu geglätteten Modellen führen (Portniaguine and Zhdanov, 1999) oder versuchen nur noch in kleineren Bereichen stark zu glätten (Yi et al., 2003; Blaschek, 2006). Die rechenzeitaufwendigste Prozedur in der Inversion stellt die Berechnung der Jacobimatrix dar. De Lugao and Wannamaker (1996) sowie Hördt (1998) beschreiben die schnelle Berechnung von Jacobimatrizen mit Hilfe der Reziprozitätsmethode. Yuval and Oldenburg (1997) zeigen in ihrer Veröffentlichung eine Methode zur 2D Inversion von Zeitbereichsdaten in Cole-Cole-Modellparameter. Eine dazu analoge Methode der Anpassung des gesamten Transienten des Abklingvorgangs, bei der der spezifische Widerstand erstmals als zeitabhängig angesehen wird, wurde 2002 an der Universität zu Köln entwickelt (Hönig and Tezkan, 2007).

Für die Auswertung der gesamten Information der Zeitreihe, um auch kleine IP-Effekte zu erfassen, werden hohe Ansprüche an die Datenqualität gestellt, was wiederum hohe Ansprüche an die Aufzeichnungsapparaturen stellt. Zur Zeit existieren einige kommerzielle Multielektroden-Geoelektrik-Apparaturen, welche auch Messungen der IP im Frequenz- bzw. im Zeitbereich zulassen (z.B. SIP Fuchs III von RADIC-RESEARCH für Frequenzbereichs-Messungen). Für die

Auswertung im Frequenzbereich existieren bereits mehrere mehrdimensionale Auswertesoftware-Pakete. Neben der Inversion in zwei Dimensionen (Oldenburg and Li, 1994; Kemna, 2000; Kenkel et al., 2012) wurden auch Algorithmen für drei Dimensionen entwickelt (Weller et al., 1996; Li and Oldenburg, 2000) und solche die die spektrale Information interpretieren (Yuval and Oldenburg, 1997). Für den Zeitbereich ist als Messgerät besonders das *Terrameter LS* der Firma ABEM hervorzuheben, welches seit 2012 erhältlich ist. Dieses ermöglicht eine schnelle und qualitativ gute Messung von IP-Daten im Zeitbereich in Form ganzer Zeitreihen, wobei standardmäßig nur das über ein Zeitfenster integrierte Signal ausgewertet wird (Dahlin and Leroux, 2012). Die klassische Messgröße ist hier die Aufladbarkeit als Fläche unterhalb der Abklingkurve der Spannung, welche standardmäßig mit konventionellen 2D Inversionsalgorithmen z.B. *RES2DINV* (Loke and Barker, 1996) ausgewertet wird. Im Rahmen einer Doktorarbeit am Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität zu Köln wurde das 2D Inversionsprogramm *IPInv* entwickelt, welches die Auswertung von vollständigen Transienten für Dipol-Dipol-Auslagen ermöglicht (Hönig, 2002) und in dem der spezifische Widerstand als zeitabhängig angenommen wird.

Die 2002 vorgelegte Dissertation von Mark Hönig beschäftigt sich mit der Entwicklung eines Auswertealgorithmus für Zeitbereichs-IP-Daten in zwei Dimensionen. Die Möglichkeit einer näherungsweisen Modellierung von IP-Transienten direkt im Zeitbereich basierend auf dem 3D DC-Vorwärtsprogramm von Spitzer (1995) wird vorgestellt. Die Verwendung einer Näherung führt zu entscheidenden Vereinfachungen und der auf ihr basierende 2D Cole-Cole-Inversionsalgorithmus *IPInv* wurde sowohl auf synthetische als auch auf Felddaten angewendet. Hönig and Tezkan (2007) gibt zudem grundlegende Einblicke in das Verhalten von Cole-Cole-Antwortfunktionen und zeigt mögliche Grenzen der Methode auf. Durch ein auf wenige Dekaden begrenztes Zeitfenster der verwendeten Messapparatur ergaben sich Einschränkungen bei der Anwendung des Algorithmus auf die Felddaten.

Grundsätzlich können die Daten der IP mit verschiedenen Ansätzen invertiert werden. So sind eine Lösung unter Berücksichtigung der EM-Effekte, welche durch das Abschalten des Stroms zwischen den Sendelektroden am Empfänger induziert werden, und eine reine Gleichstromlösung möglich. Hönig and Tezkan (2007) untersuchen beide Möglichkeiten ausführlich. Es werden erstmals EM-Effekt in einer Inversion vollständiger Transienten berücksichtigt. Diese spielen für das verwendeten Zeitfenster 10 - 3400 ms und im Besonderen für die Dipol-Dipol-Auslage jedoch nur eine untergeordnete Rolle. Nach Diskussion des geringen Einflusses der EM-Effekte kommen Hönig and Tezkan (2007) zu dem Schluss, dass diese für den verwendeten Zeitbereich und die verwendeten Auslagengrößen vernachlässigt

werden können und eine reine Gleichstromlösung genutzt werden kann.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Erweiterung des 2D IP-Inversionsalgorithmus *IPInv* von Hönig und Tezkan (2007) zu einem schnellen, effektiven und flexiblen 3D IP-Inversionsalgorithmus *IP3DInv*. Dies beinhaltet neben der Anpassung der Programmstruktur zur Reduzierung der Laufzeit und des benötigten Speichers eine Parallelisierung des Programms. Der Algorithmus soll auf flexible Elektrodenpositionen erweitert und neue Möglichkeiten der Glättung implementiert werden. Für die Inversionen sollen neben dem Cole-Cole-Modell weitere IP-Modelle zur Auswahl stehen. Das Programm soll auf synthetische und gemessene Daten angewendet werden.

Die der IP zugrunde liegende Theorie wird in Kapitel 2 vorgestellt. Dabei werden Modelle zur Beschreibung des IP-Effekts erläutert und die Messung im Frequenz- und Zeitbereich sowie ihr Bezug zueinander erklärt. Zur Überprüfung des Inversionsprogramms wurde basierend auf der DC-Vorwärtsrechnung von Spitzer (1995) unter Verwendung von Guptasarma (1982) das Programm *For3DIP* zur Vorwärtsrechnung von Zeitbereichs-IP-Daten in drei Dimensionen entwickelt. Die im Rahmen der Vorwärtsrechnung verwendete Theorie und Modellstudien für einen homogenen Halbraum und ein Blockmodell finden sich in Kapitel 3. Auch die verwendete Näherung wird erklärt. Das Prinzip der drei schrittigen 3D IP-Inversion mit *IP3DInv* wird in Kapitel 4 vorgestellt und die Grundlagen der verschiedenen Inversionsschritte erläutert. Zur Validierung des 3D IP-Inversionsalgorithmus *IP3DInv* werden Modellstudien mit synthetischen Daten für einen homogenen Halbraum und ein Blockmodell vorgestellt. Eine Anwendung des Algorithmus *IP3DInv* auf Messdaten erfolgt in Kapitel 5. Die durchgeführte Messung sowie die entwickelte Preprocessing-Routine zum Vorbereiten der Daten für die Inversion werden vorgestellt. Die erzielten Ergebnisse werden in Bezug auf vorherige Messungen und die Geologie des Messgebiets diskutiert. Anschließend werden die wichtigsten Erkenntnisse der vorliegenden Arbeit in Kapitel 6 zusammengefasst und Ideen für die weitere Zukunft vorgestellt. Im Anhang A findet sich eine Auflistung der wichtigsten verwendeten Variablen. Die Manuals der vorgestellten Programme finden sich für *For3DIP* in Anhang D, für *IP3DInv_{DC}* in Anhang E und zu *IP3DInv_{IP}* in Anhang F.

In der vorliegenden Arbeit werden Skalare stets durch Klein- und Großbuchstaben in normaler Schriftform “*a*, *A*” dargestellt. Die Verwendung von fettgedruckten Klein- und Großbuchstaben “**a**, **A**” verweist auf Matrizen, welche auch einzeilig sein können. Die Namen von Programmen, Dateien und Programmiersprachen sind kursiv geschrieben “*Fortran*”. Formeln werden durch Nummern in runden Klammern mit dem Zusatz Gleichung referenziert “Gleichung (2.10)”, durch den Zusatz

Kapitel und die entsprechende Nummer wird auf Kapitel “Kapitel 1” und auf Abbildungen durch eine Nummer mit dem Zusatz Abbildung verwiesen “Abbildung 2.1”.

2. Die Induzierte Polarisation

Als geoelektrische Methode nutzt die Induzierte Polarisation (IP) die Zeitabhängigkeit des spezifischen Widerstands der Gesteine, um eine weitergehende stoffliche und strukturelle Aussage zu ermöglichen. Neben dem Gleichstromwiderstand ρ_{dc} können zusätzliche unabhängige elektrische Parameter aufgelöst werden (Berketold et al., 2005). Zur Messung im Zeit- oder Frequenzbereich werden die in der Gleichstromgeoelektrik (DC) üblichen Vier-Punkt-Anordnungen (z.B. Dipol-Dipol, Schlumberger, Gradient) in Feldmessungen eingesetzt. Das Abklingverhalten der Spannung bei Ein- oder Ausschalten des Stroms bzw. die Amplitude der gemessenen Spannungen für verschiedene Frequenzen werden ausgewertet. Grundsätzlich sind Frequenzbereichs- und Zeitbereichs-IP in ihrer Aussagekraft gleichwertig, sofern die Spektren bzw. die Lade- und Abklingkurve vollständig bekannt sind (Berketold et al., 2005). Bei Vollständigkeit kann man die Ergebnisse theoretisch ineinander umrechnen. In diesem Kapitel werden Berketold et al. (2005) folgend die Grundlagen der Zeitbereichs-IP erläutert. Für eine weiterführende Lektüre sei auf Telford et al. (1990) verwiesen. In diesem Kapitel werden zudem Möglichkeiten der Auswertung vorgestellt. Die in der vorliegenden Arbeit verwendete Auswertemethode wird in Kapitel 3 und Kapitel 4 ausführlich beschrieben und an synthetischen Beispielen veranschaulicht.

2.1. Modelle zur Beschreibung der Effekte der Induzierten Polarisation

Für die Messung der Zeitbereichs-IP werden alternierende Gleichströme als anregendes Signal verwendet. Wie in Abbildung 2.1 skizziert, wird durch das Einschalten des primären Sendestroms I ein plötzlicher Anstieg der gemessenen Spannung auf den Wert $U_p - U_s$, gefolgt von einem kontinuierlichen Anstieg auf den maximalen Wert U_p , hervorgerufen. Beim Abschalten des Gleichstroms macht sich die IP durch ein Abweichen vom idealen Spannungsabfall bemerkbar. Die Spannung sinkt zunächst abrupt auf den Wert U_s und dann exponentiell weiter auf Null ab.

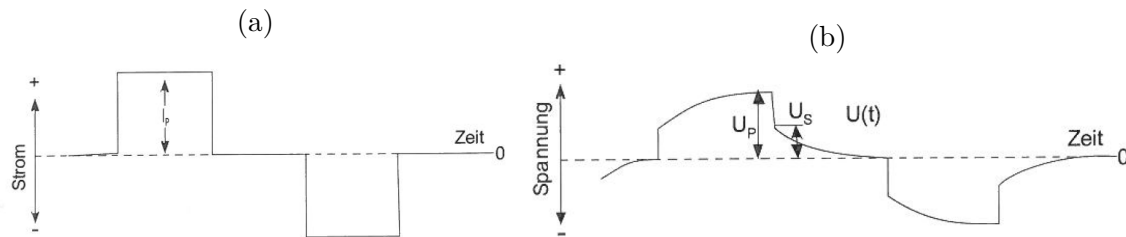


Abbildung 2.1.: (a) Der zeitliche Verlauf des anregenden alternierenden Gleichstroms I ist skizziert. (b) Dargestellt ist der entsprechende zeitliche Verlauf der resultierenden Spannung $U(t)$ oberhalb eines polarisierbaren Untergrunds (Berketold et al., 2005).

Ursache für die IP sind elektrochemische Vorgänge, welche auf dem Wechsel von elektronischer und elektrolytischer Leitfähigkeit und auf Variationen der Ionenbeweglichkeit eines Elektrolyts im Porenraum der Gesteine beruhen. Wird ein polarisierbares Material durch ein äußeres Feld in ein Ungleichgewicht gebracht, versucht das Medium einen Gleichgewichtszustand herzustellen und es kommt zu Ladungstrennung (Dipolbildung). Auf diesem Weg wird im polarisierbaren Medium Energie gespeichert. Wird das äußere Feld ausgeschaltet, liegt im Medium zunächst ein Ungleichgewicht vor. Das polarisierbare Medium stellt wieder einen Gleichgewichtszustand her und die dabei freigesetzte Energie macht sich nach dem Abschalten des äußeren Felds als transiente Spannung bemerkbar. Die endliche Geschwindigkeit der Dipolbildung zeigt sich in den Auf- und Entladekurven, welche durch eine für einen RC-Stromkreis typische exponentielle Form angenähert werden können. Die unterschiedlichen stofflichen Fähigkeiten Energie zu speichern führen zu Unterschieden in den Charakteristiken der gemessenen Abklingkurven.

Die Aufladbarkeit eines polarisierbaren Untergrunds ist abhängig von der Lithologie und beruht hauptsächlich auf der Elektroden- und Membranpolarisation, wobei erstere meist als dominierend angesehen wird (Telford et al., 1990). Bei Zeitbereichsmessungen treten für späte Zeiten ($> n \cdot 100$ ms) physikochemische Reaktionen auf, so kommt es zu Ladungsaustausch bzw. -bewegungen innerhalb des Porenraums. Neben Oxidations- und Reduktionsvorgängen an metallischen Bestandteilen kann es beispielsweise zu Kationenaustausch bei Tonmineralen und einer Vielzahl von Reaktionen zwischen Tonen und organischen Substanzen kommen. Aus einem Porenraum, welcher mit einem gleichstromleitenden Elektrolyt gefüllt ist, und einer nichtleitenden Gesteinsmatrix bestehende Modelle müssen für eine Erklärung des IP-Effekts erweitert werden. Zu berücksichtigen sind zusätzlich die Bildung elektrischer Doppelschichten an Gesteinsoberflächen, die Porenraumstruktur und der Ionengehalt der elektrolytischen Porenfüllung.

Die elektrische Doppelschicht

Treten die negativen Oberflächenladungen der Matrix in elektrochemische Interaktion mit den Anionen und Kationen des Elektrolyts im Porenraum, bildet sich eine Doppelschicht an der Phasengrenze Elektrolyt/Mineraloberfläche aus. Diese besteht aus einer negativen Schicht an der Mineraloberfläche und einer angrenzenden positiv geladenen Schicht im Elektrolyt, welche sich aus der Stern-Schicht und der Diffusen-Schicht zusammensetzt. Die elektrische Doppelschicht eines Tonminerals, welche sich in Folge eines statischen Gleichgewichtsprozesses bildet, ist in Abbildung 2.2 dargestellt.

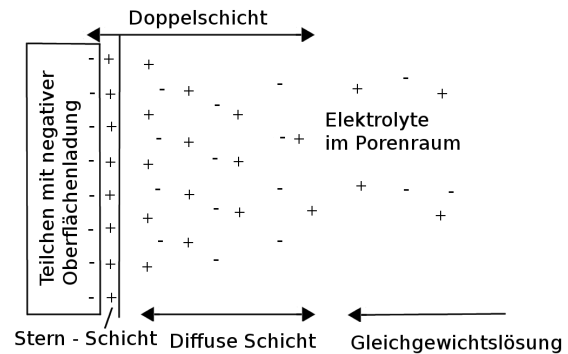


Abbildung 2.2.: Elektrische Doppelschicht eines Tonminerals bestehend aus einer negativen Schicht an der Mineraloberfläche und einer angrenzenden positiven Schicht im Elektrolyt (nach Berkold et al., 2005; Wienberg, 1990).

In der Stern-Schicht direkt an der Mineraloberfläche befinden sich wenige Moleküle (Kationen), welche fest angelagert sind. In der angrenzenden Diffusen-Schicht nimmt die Konzentration der Kationen, welche frei beweglich sind, exponentiell ab. Die Ausdehnung der Doppelschicht wird maßgeblich durch die relative Dielektrizitätskonstante ϵ_r und die Ionenkonzentration n des Elektrolyts bestimmt. Die Stärke der Doppelschicht kann durch Salze oder Kohlenwasserstoffkontaminanten verringert werden. Die Grenzflächenleitfähigkeit ist an die große spezifische (innere) Oberfläche toniger Gesteine gebunden und führt zu einer starken Zunahme der Leitfähigkeit. Bei hohem Tongehalt und einer geringen Leitfähigkeit des Porenwassers wirkt sich die Grenzflächenleitfähigkeit stärker aus.

2.1.1. Porenstruktur und Mineralgehalt

Makroskopisch betrachtet, wird die elektrische Leitfähigkeit σ im Wesentlichen durch den Ionentransport im Elektrolyt bestimmt. Wie in Abbildung 2.3 skizziert, entstehen an Porenengstellen Ladungsansammlungen, welche sich mit einer zeitlichen Verzögerung gegenüber dem anregenden Strom auf- und abbauen. Engstellen werden als “aktiv” bezeichnet, da sie Energie speichern, und Bereiche weiter Porenräume als “passiv”. Für den IP-Effekt sind Anzahl, Abstand und Größe der aktiven Zonen von größerer Bedeutung als der Mineralbestand (Berkold et al., 2005). Existieren Unterschiede in der Beweglichkeit der Ionen, was besonders bei Anionen und Kationen gegeben ist, kommt es bei angelegtem Strom zu Polarisierungseffekten.

Membranpolarisation

In Abbildung 2.4 ist ein poröses Gestein, welches Tonpartikel enthält, und der Aufbau einer negativen Oberflächenladung skizziert. Nach Telford et al. (1990) können die sich anlagernden Kationen (dargestellt durch ausgefüllte Kreise) Bereiche bis zu 10^{-6} cm im Fluid abdecken. Wenn dies mit den Ausmaßen der Poren selbst übereinstimmt, wird der Fluss von Anionen (dargestellt durch leere Kreise) durch diese Porengänge verhindert, so dass die Membranpolarisation meist in Gesteinen mit kleinen Porenweiten auftritt.

Beim Anlegen eines Stroms entstehen Zonen erhöhter und verminderter Ionenkonzentration, welche sich bei Abschalten des Stroms in einer endlichen Zeit wieder abbauen. Der Auf- und Abbau der Ionenanhäufungen ist als IP-Effekt messbar.

Die Membranpolarisation ist meist mit dem Vorhandensein von Tonpartikeln in relativ kleinen Porenräumen verbunden, die Amplitude der Polarisation wächst aber nicht kontinuierlich mit der Konzentration der Tonpartikel. Nach einem erreichten Maximum fällt sie trotz weiter steigendem Tonanteils wieder ab, was an dem benötigten Wechsel von kleinen und großen Porenräumen liegt. Eine maximale Membranpolarisation wird in Gesteinen mit einem gestreuten Tonanteil in der Matrix mit $\leq 10\%$ und einem salzhaltigen Elektrolyt erreicht (Berkthold et al., 2005).

Elektrodenpolarisation

Nur relativ wenige Minerale besitzen eine metallische oder Elektronenleitfähigkeit. Nach Telford et al. (1990) zählen zu diesen fast alle Sulfide und einige Oxide (z.B. Magnetit und Graphit). Blockiert ein Metallkorn den Porenraum (siehe Abbildung 2.5), akkumulieren beim Anlegen einer Spannung positive und negative Ionen auf jeder Seite des Korns. Dieser Effekt, in der physikalischen Chemie auch als Überspannung bekannt, wird als Elektrodenpolarisation bezeichnet (Telford et al., 1990). Es werden entweder Elektronen von der Kornoberfläche aufgenommen oder abgegeben. Dadurch kommt es zu einem Ladungsaufbau um das Metallkorn herum.

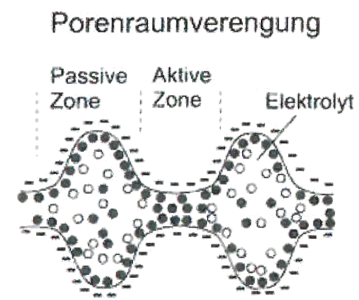


Abbildung 2.3.: Skizziert ist der typische Aufbau einer Porenraumverengung (Berkthold et al., 2005; Schön, 1983).

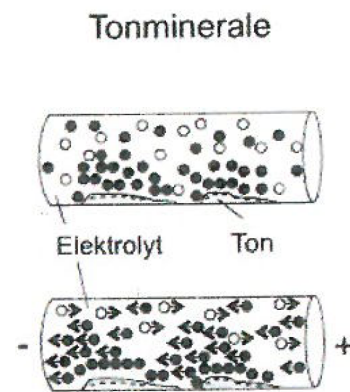


Abbildung 2.4.: Ionenkonzentration eines Elektrolyts mit Tonpartikeln ohne und mit anliegendem Gleichstrom (Berkthold et al., 2005; Schön, 1983).

Wird der Strom abgeschaltet, kommt es zur allmählichen Rückdiffusion der Ionen, was ebenso wie der Aufbau als IP-Effekt messbar ist.

Die Magnitude der Polarisation hängt neben dem anregenden Stromsignal von der Mineralkonzentration, der Mineraloberfläche, der Porosität und dem spezifischen Widerstand des Gesteins ab (Telford et al., 1990). So erwartet man bei disseminierten Mineralen eine höhere Polarisation als bei massiven Mineralen. Die durch die Elektrodenpolarisation verursachten Effekte sind meist um eine Größenordnung größer als die von der Membranpolarisation verursachten.

Wichtige Gesteinstypen

Berketold et al. (2005) definieren die wichtigsten Gesteinstypen für die Induzierte Polarisation als:

- Sandige Lockersedimente mit einem Tongehalt von 3 - 20 %:
Die dispersiv im Porenraum verteilten Tonmineralen führen zu unterschiedlichen Beweglichkeiten der Ionen. In aktiven Zonen werden die Anionen gebremst, so dass ein Ionensiebeffekt auftritt und es zu einer Deformation der Diffusen-Schicht kommt.
- Tonfreie Sande und Festgesteine mit Mikroklüftung:
Hierbei ist die Porenraumstruktur durch den Wechsel von engen und weiten Poren gekennzeichnet. Kationen lagern sich an den negativen Oberflächen der Matrix an, so dass sie in Wolkenform die Porenräume blockieren.
- Gesteine mit elektronenleitenden Mineralen:
Durch die verzögerte Aufnahme bzw. Abgabe von Elektronen bei Oxidations- und Reduktionsprozessen kommt es zu einer Ladungsanhäufung an der Oberfläche der Mineralkörner.

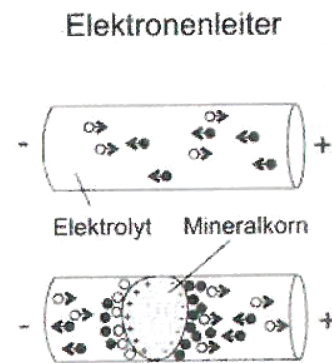


Abbildung 2.5.: Ungehindert und durch ein Mineralkorn gehinderter elektrischer Fluss im Elektrolyt (Berketold et al., 2005; Schön, 1983).

2.1.2. Qualitative Beschreibung durch Ersatzschaltbilder

Die Energie des IP-Effekts wird ähnlich wie in einem Kondensator gespeichert, so dass die Lade- und Entladekurve durch die für einen RC-Stromkreis typische exponentielle Form angenähert und der IP-Effekt qualitativ durch Ersatzschaltbilder beschrieben werden kann. Neben dem im Folgenden vorgestellten Ersatzschaltbild

nach Cole and Cole (1941) gibt es eine Vielzahl von alternativen Modellen (Dias, 2000).

In Abbildung 2.6 (a) ist ein Ersatzschaltbild des in (b) skizzierten Gesteins dargestellt. Der Parallelwiderstand R_0 von Poren ohne Metallkörner oder Tonpartikel wird in der Praxis stets äquivalent zu dem spezifischen Gleichstromwiderstand ρ_{dc} verwendet (Hönig and Tezkan, 2007). Der elektrolytisch leitende Anteil der Poren mit Körnern wird durch R_1 und die Wirkung der Grenzschicht von Metall und Tonkörnern über Z_m beschrieben. Der Gesamtwiderstand $R(\omega)$ der Ersatzschaltung ergibt sich aus einer Parallelschaltung eines ohmschen Gleichstromwiderstands R_0 und eines verlustbehafteten Kondensators $R_1 + Z_m$:

$$\frac{1}{R(\omega)} = \frac{1}{R_0} + \frac{1}{R_1 + Z_m(\omega)}. \quad (2.1)$$

Die Impedanz $Z_m = (i\omega\chi)^{-c}$ beschreibt das Verhalten eines polarisierbaren Gesteins bei zeitlich veränderlichen Strömen, wobei χ für den Fall $c = 1$ eine Kapazität ist. Bei ω handelt es sich um die Kreisfrequenz und bei c um den Frequenzexponenten. Mit der Aufladbarkeit m und der Zeitkonstante des Relaxationsprozesses τ werden zwei neue Größen definiert:

$$m = \frac{R_0}{R_0 + R_1} \quad (2.2)$$

$$\tau = \chi \left(\frac{R_0}{m} \right)^{-c} \quad (2.3)$$

Nach Hönig and Tezkan (2007) bestimmt die Aufladbarkeit m die Amplitude des dynamischen Bereichs des Transienten. Sie variiert zwischen 0 und $1000 \frac{\text{mV}}{\text{V}}$ und ist der zuverlässigste Parameter zur Identifizierung von Polarisationseffekten (Dias, 2000). Durch Variationen der Relaxationszeit τ , welche Informationen über die Korngrößen enthält, wird die relative Lage des Zeitfensters, in welchem gemessen wird, zu dem dynamischen Bereich des Transienten variiert (Hönig and Tezkan, 2007; Blaschek, 2006). Der Gesamtwiderstand $R(\omega)$ kann durch die Cole-Cole-Formel beschrieben werden:

$$R(\omega) = R_0 \left(1 - m \left(1 - \frac{1}{1 + (i\omega\tau)^c} \right) \right) \quad (2.4)$$

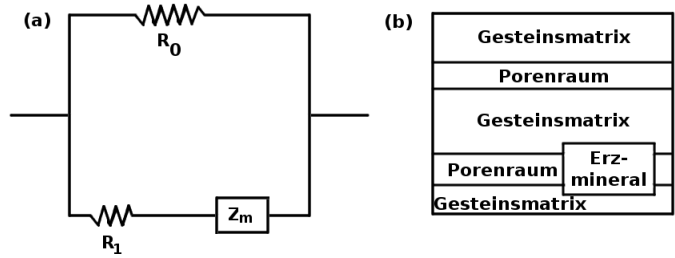


Abbildung 2.6.: (a) Ersatzschaltbild nach Cole and Cole (1941) zur qualitativen Beschreibung des IP-Effekts des in (b) skizzierten Gesteins (nach Pelton et al., 1978).

Der Frequenzexponent c liegt zwischen 0 und 1 und gibt Auskunft über den Größenbereich der vorhandenen Korngrößen (Blaschek, 2006). Ein groß gewähltes c bedingt eine größere Steilheit des Transienten im dynamischen Bereich um die Relaxationszeit τ . Dabei beeinflusst τ die Lage des Wendepunkts des Transienten und den Bereich des Extremum der Phase (Hönig and Tezkan, 2007). Nach Blaschek (2006) wurde c in früheren Beschreibungen meist gleich 0,5 gesetzt und mit dem Warburg-Modell ein rein diffusionskontrollierter Prozess beschrieben. Die meisten mineralisierten Gesteine weisen Werte zwischen 0,1 und 0,6 mit einem Mittelwert bei 0,25 auf, so dass ein durchschnittliches c von 0,25 nach dem Madden-Cantwell-Modell meist eine zulässige Annahme ist. Eine Beschreibung mit $c = 1$ ist über das Debye-Modell möglich (Dias, 2000).

Für eine sehr kleine Frequenz f nahe Null ist $R(\omega) = R_0$. Geht die Frequenz f gegen unendlich, dann gilt

$$R(\omega) = R_0(1 - m). \quad (2.5)$$

2.2. Messung der Induzierten Polarisation

Kommerzielle Messgeräte bestehen meist aus einem Sender und einem galvanisch getrennten Empfänger, wie die *SIP-FUCHS-3* der Firma Radic-Research für den Frequenzbereich. Für den Zeitbereich steht das *Terrameter LS* der Firma ABEM, welches Sender und Empfänger in einem Gerät vereint, als kommerzielles Messgerät

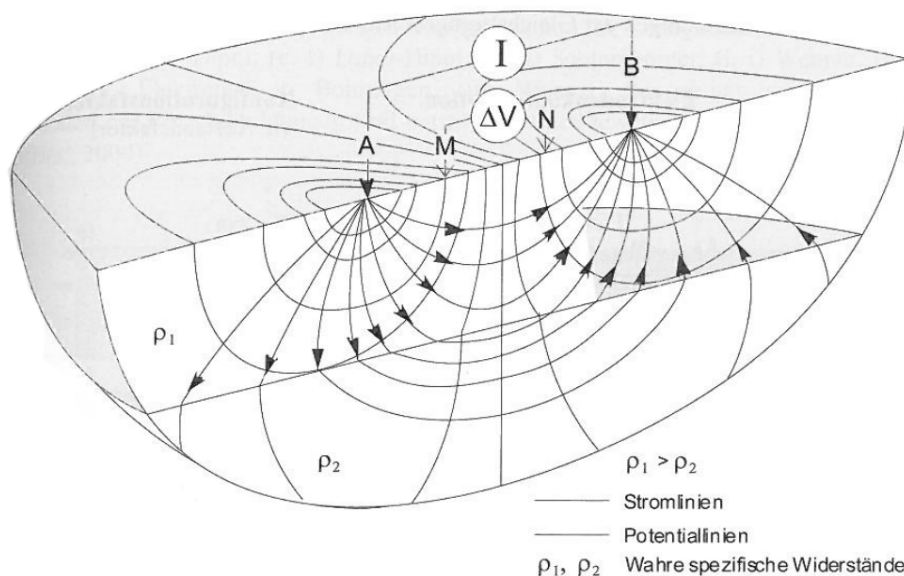


Abbildung 2.7.: Prinzip einer Widerstandsmessung mittels Vierpunktanordnung. Die Positionen der Sendeelktroden, welche einen Strom I einspeisen, sind durch A und B und die der Potentialelektroden, welche eine Potentialdifferenz ΔV messen, durch M und N gekennzeichnet. Die Stromlinien sind durch Linien mit Pfeilen und die Potentiallinien durch Linien dargestellt (Berkthold et al., 2005).

zur Verfügung. Für oberflächennahe Erkundungen reicht meist das Speisen des Senders mit Autobatterien aus. Das im Rahmen dieser Arbeit als Messgerät verwendete *Terrameter LS* wird in Kapitel 5.2 genauer vorgestellt.

In Abbildung 2.7 ist das Prinzip einer Widerstandsmessung mittels einer Vierpunktanordnung skizziert. Über zwei Stromelektroden A und B wird ein Strom I in den Boden eingespeist und mittels zweier Potentialelektroden M und N die auftretende Potentialdifferenz ΔV gemessen. Für die Berechnung des Widerstands aus der Potentialdifferenz zwischen den Sonden M und N sei auf Kapitel 3.1.5 verwiesen.

2.2.1. Messgrößen im Zeitbereich

Mit Vierpunktauslagen, wie beispielsweise einer Gradientenauslage in Abbildung 2.8, werden Zeitreihen aufgezeichnet. Es befinden sich sowohl innerhalb als auch außerhalb des Senderdipols Empfangsdipole. Bei mehreren galvanisch getrennten Empfangskanälen können mit Multielektrodenauslagen mehrere Empfänger gleichzeitig aufgezeichnet werden, so dass ein großer Messfortschritt in geringer Zeit erzielt werden kann.

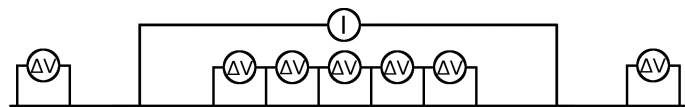


Abbildung 2.8.: Skizziert ist eine Gradientenauslage mit einem Sender und sieben Empfängern.

Der Abfall der Spannung einer solchen Zeitreihe ist beispielhaft in Abbildung 2.9 abgebildet. Nach dem Abschalten des Stroms fällt die Spannung schlagartig von dem maximalen Wert der Spannung U_p bei fließendem Speisestrom auf den Wert U_s . Nach Telford et al. (1990) kann die Zeitreihe im Moment des Abschaltens von elektromagnetischen Effekten, wie beispielsweise Selbstinduktion der Kabel, beeinflusst sein. Der Moment des Abschaltens wird deshalb häufig ausgeblendet, so dass die Größe U_s nur schwer bestimmt werden kann. Es gibt verschiedene Möglichkeiten die aufgenommenen Zeitreihen auszuwerten:

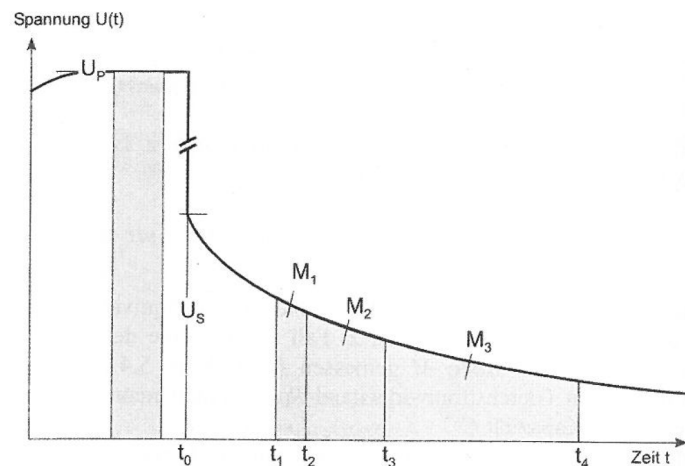


Abbildung 2.9.: Beispielhaft ist ein Abfall der Spannung nach dem Abschalten des Stroms dargestellt (Berkthold et al., 2005; Sumner, 1976).

1. Abschätzung des IP-Effekts im Zeitbereich durch den Vergleich der Spannung U_t zum Zeitpunkt t mit U_p nach Telford et al. (1990):

$$\frac{U(t_1)}{U_p} \quad (2.6)$$

2. Berechnung der Aufladbarkeit m [$\frac{\text{mV}}{\text{V}}$] und der zur gespeicherten Energie proportionalen Integrierten Aufladbarkeit M [ms] (Berkthold et al., 2005):

$$m = \frac{U_s}{U_p} \quad (2.7)$$

$$M = \frac{1}{U_p} \int_{t_0}^{t_n} U(t) dt \quad (2.8)$$

3. Die Auswertung der gesamten Zeitreihe und eine entsprechende Interpretation des Transienten beispielsweise durch das Cole-Cole Modell in Gleichung (2.4) und die Auflösung der Relaxationszeit τ und des Frequenzexponenten c zusätzlich zur Aufladbarkeit m und dem Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (Hönig and Tezkan, 2007).

Die meisten Apparaturen bestimmen bereits die Aufladbarkeit und den Gleichstromwiderstand, und beschränken so die Möglichkeit der Interpretation, nur wenige speichern die gesamte Zeitreihe für eine externe Berechnung der Aufladbarkeit. Der Quotient in Gleichung (2.6) kann beispielsweise als eine erste Abschätzung genutzt werden, um einen Überblick über die Verteilung von IP-Effekten in einem Messgebiet zu erlangen. Jedoch sind die so gewonnenen Ergebnisse schwer für verschiedene Messgeräte oder Messgebiete zu vergleichen. Gebräuchlich sind meist die durch Gleichung (2.7) und Gleichung (2.8) definierten Größen zur Auswertung und Interpretation der Daten im Zeitbereich. Ihre Bedeutung lässt sich beispielsweise durch die Annahme des Debye-Modells ($c = 1$ in Gleichung (2.4)) veranschaulichen (Berkthold et al., 2005):

$$m = \frac{U_s}{U_p} = \frac{R_0}{R_0 + R_1} \quad (2.9)$$

$$M = \frac{1}{U_p} \int_0^\infty U(t) dt = m\tau = R_0 C \quad (2.10)$$

Diese Definitionen sind nicht äquivalent und die nach Gleichung (2.8) erweist sich in der Praxis, aufgrund der Schwierigkeiten beim Messen während des Abschaltens des Stroms, als stabiler. Das Programm *RES2DINV* nutzt zum Auswerten von Zeitbereichs-IP-Messungen die mit Gleichung (2.8) beschriebene Möglichkeit (Loke and Barker, 1996). Die Auswertung der gesamten Zeitreihe ermöglicht die Bestimmung weiterer Parameter entsprechend des zur Interpretation genutzten Modells.

Beim Cole-Cole Modell in Gleichung (2.4) können so neben der Aufladbarkeit m und dem Gleichstromwiderstand ρ_{dc} auch die Relaxationszeit τ und der Frequenzexponent c bestimmt werden. Die vorliegende Arbeit nutzt die Möglichkeit der Auswertung der gesamten Zeitreihe.

Tabelle 2.1.: *Integrierte Aufladbarkeit von Gesteinen und Mineralen. Die Ladenzeiten der einzelnen Messungen sind Telford et al. (1990) zu entnehmen.*

Gesteinstyp	Integrierte Aufladbarkeit M [ms]
Erz - Sulfidgehalt 2 - 20%	500 - 3000
vulkanische Tuffe	300 - 800
Schluffstein	100 - 500
dichte Vulkanite	100 - 500
Schiefer	50 - 100
Pyrit	13,4
Chalkosin	13,2
Kupfer	12,3
Graphit	11,2
Granit, Granodiorit	10 - 50
Kalke, Dolomit	10 - 20
Kupferkies	9,4
Bornite	6,3
Quarzite	5 - 12
Bleiglanz	3,7
verfestigte Tone	3 - 10
Sandstein	3 - 12
kristalline Schiefer	5 - 20
Gneise	6 - 30
Vulkanite	8 - 20
Kiese, Schotter	3 - 9
Magnetit	2,2
Alluvium	1 - 4
Malachit	0,2
Hämatit	0,0
Wasser	0

In Tabelle 2.1 sind die Integrierten Aufladbarkeiten M nach Gleichung (2.8) von Gesteinen und Mineralen aufgelistet. Die Integrationszeiten betrugen mindestens 1 s, so dass die Werte aufgrund der langen Integrationszeit meist höher sind als im Feld gemessene. Nach Telford et al. (1990) sind Labormessungen schwierig durchzuführen, so variiert die Polarisation beispielsweise stark in Abhängigkeit von der Sättigung der Porenräume mit Wasser, und ein Vergleich von Labor- und Feldmessungen ist nur bedingt möglich. Die Hintergrundpolarisation variiert von Messgebiet zu Messgebiet (Telford et al., 1990). Sie liegt meist in Bereichen eines Gesteins mit 1 bis 2 % leitfähigen Mineralen, kann allerdings auch ein Zehntel bis das Zehnfache dieses

Werts betragen.

2.2.2. Messgrößen im Frequenzbereich

Die relative Differenz zwischen den Widerständen bei Anregung mit Gleichstrom ρ_{dc} ($\rho(\omega = 0)$) und bei Anregung mit einem im Idealfall unendlich hochfrequenten Wechselstrom ρ_{ac} ($\rho(\omega = \infty)$) ist als Frequenzeffekt FE über

$$FE = \frac{\rho_{dc} - \rho_{ac}}{\rho_{ac}} = \frac{\rho_{dc}}{\rho_{ac}} - 1 \quad (2.11)$$

definiert. Der prozentuale Frequenzeffekt PFE ist als das hundertfache des Frequenzeffekts FE definiert.

Bei einem hohen Gehalt an metallischem Material, welcher meist zur Kombination von niedrigen Widerständen und starken IP-Effekten führt, ist es zweckmäßig den Metallfaktor MF zu verwenden

$$MF = 2\pi \times 10^5 \frac{FE}{\rho_{dc}}. \quad (2.12)$$

Dieser ermöglicht eine Abgrenzung von belasteten Bereichen, jedoch keine quantitative Aussage zum Metallgehalt. Zur vollständigen Erfassung des IP-Effekts kann der frequenzabhängige spezifische Widerstand über einen möglichst weiten Frequenzbereich im Rahmen einer SIP-Messung aufgezeichnet werden. Dazu werden üblicherweise 15 bis 20 Messungen im Bereich von 0,1 Hz bis 1 kHz durch-

geführt. Für den frequenzabhängigen komplexen Widerstand $\rho(\omega)$ gilt nach Berkold et al. (2005)

$$\rho(\omega) = k \frac{U(\omega)}{I(\omega)} = \Re[\rho(\omega)] + i\Im[\rho(\omega)] \quad (2.13)$$

mit dem Realteil \Re (Speisestrom und Spannung befinden sich in Phase) und dem Imaginärteil \Im (Speisestrom und Spannung sind um 90° phasenverschoben). k ist der Geometriefaktor der Messanordnung, $U(\omega)$ die Sondenspannung und $I(\omega)$ der

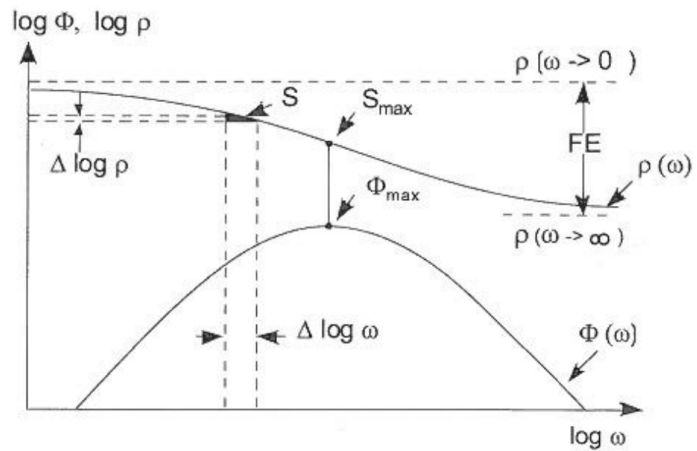


Abbildung 2.10.: Der frequenzabhängige Widerstand ρ und die Phase Φ sind schematisch nach dem Modell von Cole-Cole dargestellt (Berkold et al., 2005).

Speisestrom.

Aufgrund der eindeutigen Beziehung zwischen FE , frequenzabhängigem Widerstand $|\rho(\omega)|$ und Phase $\Phi(\omega)$ wird zur Veranschaulichung der Frequenzcharakteristik meist nur die Phase dargestellt. In Abbildung 2.10 ist neben der Phase auch der frequenzabhängige Widerstand schematisch dargestellt. Der Punkt der größten relativen Widerstandsänderung S_{max} (Wendepunkt) und das Phasenmaximum Φ_{max} fallen zusammen und befinden sich in der Warburg-Region, welche durch den IP-Effekt bestimmt wird.

Zusammenhang zwischen den Messgrößen im Zeit- und Frequenzbereich

Nach Berkthold et al. (2005) lässt sich die theoretische Beziehung des Frequenzeffekts FE zur Aufladbarkeit m über

$$FE = \frac{m}{1 - m} \quad (2.14)$$

beschreiben. Ist der Abstand zwischen den Frequenzen bzw. die Länge der Integrationszeit hinreichend groß, so kann in einer Vielzahl von praktischen Fällen $m \ll 1$ angenommen werden und somit $FE = m$. Unter realen Messbedingungen ist dies jedoch häufig nicht erfüllt, so dass nur näherungsweise eine Proportionalität zwischen FE und m besteht. Telford et al. (1990) betonen die Schwierigkeit der Umrechnung der Messgrößen ineinander.

2.2.3. Auswertung von IP-Felddaten

Ob ein Untersuchungsobjekt durch IP-Messungen erfasst werden kann, hängt neben dessen Tiefenlage und Größe auch vom Kontrast der elektrischen Gesteinsparameter zur Umgebung ab. Desweiteren beeinflussen die eingesetzte Messkonfiguration, die Stromstärke, der Störpegel und die elektromagnetischen Kopplungsbedingungen die Auflösung (Berkthold et al., 2005). Feldmessungen der IP sind gegenüber äußeren technischen Störungen, metallischen Ablagerungen, Kabel- und Leitungssystemen im Untergrund besonders anfällig. Der Einfluss im Vorfeld bekannter möglicher Störungen und die Auflösbarkeit verschiedener Strukturen im Untergrund können mittels Modellierungen im Vorfeld untersucht bzw. abgeschätzt werden. Nach Telford et al. (1990) ist der IP-Effekt nicht immer positiv. Besonders in der Umgebung von zweidimensionalen oder dreidimensionalen polarisierbaren Körpern können negative scheinbare IP-Effekte auftreten, welche von kapazitiven Kopplungseffekten meist durch ihre Amplitude zu unterscheiden sind (siehe auch Kapitel 3.2.2) (Dahlin and Leroux, 2012).

Sowohl im Feld als auch bei der Auswertung sind IP-Messungen erheblich aufwendiger und störanfälliger als Geoelektrikmessungen (Berkthold et al., 2005). So sollten

die Zeitfenster des Messzyklus hinreichend groß sein und die Stromkabel nicht parallel, in direkter Nähe zu den Sondenkabeln verlaufen. Mögliche Fehlerquellen können ebenfalls zu hohe Übergangswiderstände und schlecht angekoppelte Sonden sein. Ein möglicher Messaufbau, welcher diese Probleme minimiert, wird in Kapitel 5.2 beschrieben.

Elektromagnetische Effekte

Elektromagnetische Effekte machen sich besonders bei langen, parallel geführten Kabeln, frühen Zeiten, großen Erkundungstiefen und niedrigen Widerständen bemerkbar und lassen sich nach Telford et al. (1990) mit

$$t < \frac{2\pi(nx)^2}{4 \cdot 10^4 \rho} \quad (2.15)$$

abschätzen. Die maximale Auslagengröße nx wird in [m] und der Widerstand ρ in [Ωm] eingesetzt. Es ergibt sich eine Zeit t in [s] ab welcher die Effekte elektromagnetischer Kopplung vernachlässigt werden können. Hönig and Tezkan (2007) zeigen, dass für kleine Dipollängen selbst bei großen Dipolabständen bis zu 45 m die elektromagnetischen Effekte bereits nach 1 ms vollständig abgeklungen sind. Sie folgern, dass das in dieser Arbeit betrachtete Zeitfenster nicht mehr vom EM-Effekt betroffen ist und für die Inversion gänzlich auf EM-Effekte verzichtet werden kann.

Schichtauflösung

Bei dem Abbildung 2.11 zugrunde liegenden Modell handelt es sich um eine nicht polarisierbare Deckschicht oberhalb eines polarisierbaren Halbraums. Man kann erkennen, dass sich die gemessene scheinbare Polarisation IP_a mit wachsender Auslagenweite $AB/2$ der wahren Polarisation IP_2 nähert.

Die Bestimmung der Tiefenlage, des spezifischen Widerstands und der Polarisaton der 2. Schicht wird grundsätzlich von großen Widerstandskontrasten erschwert. Bei einem Widerstandskontrast von 1:39 verringert sich der gemessene IP-Effekt gegenüber einem Zweischichtfall ohne Kontrast um eine Größenordnung. Als Konsequenz muss zum Nachweis der Schicht die Auslagenweite erhöht werden. Die Überlagerung durch extrem leitfähige Schichten kann zu einer Strom-Kanalisation und so zu einer Maskierung von Schichten führen, welche eigentlich eine hohe IP-Response erzeugen würden (Seigel and Howland-Rose, 1990). Häufig wird die Tiefenlage detektierter Strukturen überschätzt (Telford et al., 1990).

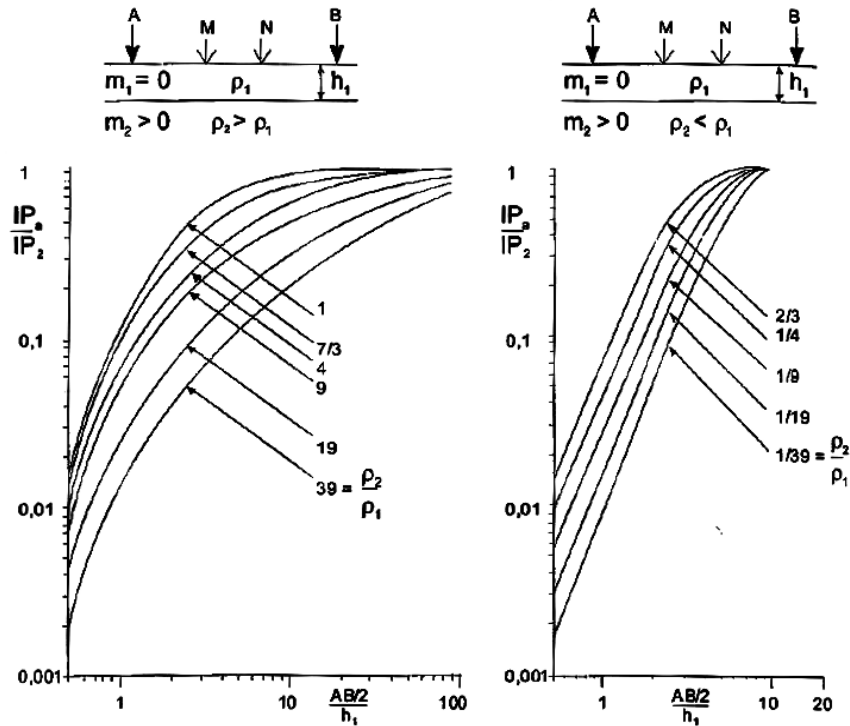


Abbildung 2.11.: Dargestellt ist der relative IP-Effekt über einem zweischichtigen horizontalen Untergrund. h_1 ist die Mächtigkeit der Deckschicht und $AB/2$ die Auslagenweite einer Schlumberger-Anordnung. Einer nicht polarisierbaren Deckschicht folgt ein polarisierbarer homogener Halbraum (Berktoed et al., 2005; Bertin and Loeb, 1976).

Interpretation der IP-Messdaten

Für einen ersten Überblick sind bei ausreichend geringen Messpunktabständen sogenannte “Pseudo-Tiefensektionen” geeignet. Dazu werden die Originalmesswerte, welche als scheinbare Widerstände bezeichnet werden, in einer zweidimensionalen räumlichen Verteilung dargestellt. Das Verfahren ist in Abbildung 2.12 skizziert. Am Schnittpunkt der beiden Linien, welche mit einer Steigung von 45° von den Zentren der Dipole ausgehen, werden die Messwerte aufgetragen. Durch Isolinien können die verschiedenen Wertebereiche getrennt werden. Es ist eine qualitative Abschätzung von Lage und Neigung von Grenzflächen möglich. Unter Umständen ist es möglich den Aufbau des Untergrunds abzuschätzen, so dass beispielsweise Glättungsparameter und Startmodell für eine Inversion abgeschätzt werden können. Pseudosektionen bieten allerdings nur ein verzerrtes Bild des Untergrundes, welches durch Filter zwar verbessert werden kann, aber dennoch nur die scheinbaren Widerstände enthält.

Die Ermittlung wahrer spezifischer Widerstände und Polarisierungseigenschaften der Gesteine sowie die lagegerechte Zuordnung im Untergrund erfolgt durch eine Inversionen in bis zu drei Dimensionen. Zu den oben beschriebenen möglichen Fehlerquellen kommt die große Anzahl an Äquivalenzmodellen, welche bei gleichem Fehler

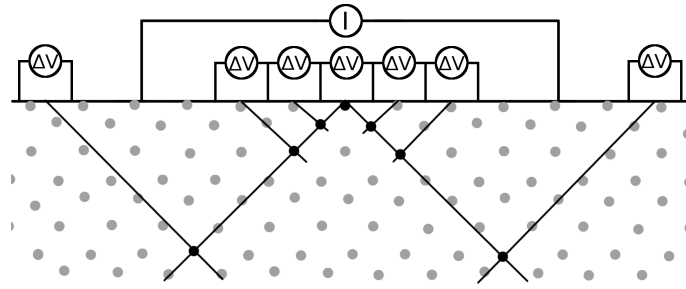


Abbildung 2.12.: Für eine sogenannte Pseudosektion werden die Messwerte in einer zweidimensionalen räumlichen Verteilung dargestellt. An den Schnittpunkten der Linien, welche mit einer Steigung von 45° von den Zentren der Dipole ausgehen, werden die Messwerte aufgetragen.

die Messdaten erklären, hinzu. Aufgrund der Anzahl von vier IP-Modellparametern je Zelle ergibt sich ein sehr stark unterbestimmtes Problem und somit besonders hohe Anforderungen an den Inversionsalgorithmus (siehe Kapitel 4.3.2). In Abbildung 2.13 ist in schwarz der Verlauf des zeitabhängigen Widerstands, berechnet oberhalb eines Homogenen Halbraums mit $\rho_{dc} = 100 \, \Omega\text{m}$, $m = 500 \, \frac{\text{mV}}{\text{V}}$, $\tau = 0,5 \text{ s}$ und $c = 0,25$, eingezeichnet. Ein 5%iger Fehlerbereich ist eingezeichnet und Transienten für homogene Halbräume mit um 100% erhöhten (blau) und um 50% erniedrigten (grün) Relaxationszeiten. Innerhalb der Fehlerbalken erklären alle drei IP-Modelle die Transienten. Eine Erniedrigung des Frequenzexponenten um 50% (lila) führt zu

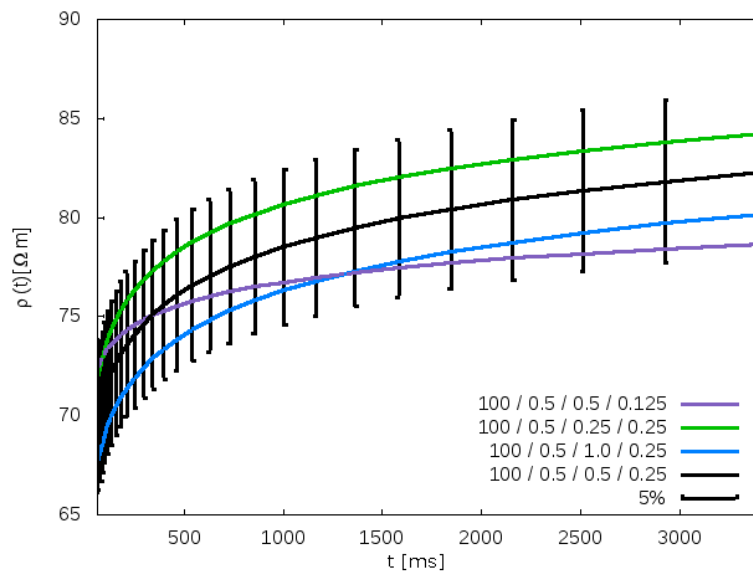


Abbildung 2.13.: Die schwarze Linie markiert den Verlauf des zeitabhängigen Widerstands gemessen oberhalb eines homogenen Halbraums. Für ein um 100% erhöhtes τ (blau), ein um 50% erniedrigtes τ (grün) und ein um 50% erniedrigtes c (lila) sind die Transienten dargestellt.

einer deutlichen Verformung des Transienten und für frühe Zeiten kann der Transi-

ent auch innerhalb der Fehler von dem original Transienten unterschieden werden. Variationen von τ führen häufig zu einer Vielzahl von Äquivalenzmodellen, so dass die Auflösung von Relaxationszeiten durch IP-Inversionen schwerer zu realisieren ist als die es Frequenzexponenten. Durch eine gute Wahl des Startmodells mittels a priori Informationen, kann die Inversion häufig entschieden verbessert und ein glaubwürdiges Modell zur Erklärung der Daten gefunden werden. Der im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelte Inversionsalgorithmus *IP3DInv* zur Auswertung von IP-Messdaten wird in Kapitel 4 vorgestellt.

3. Vorwärtsrechnung in drei Dimensionen

Für ein vorgegebenes Untergrundmodell können mittels einer Vorwärtsrechnung für festgelegte Sender-Empfänger-Kombinationen der zeitabhängige Widerstand berechnet werden, welcher oberhalb des Untergrunds gemessen werden würden. Zur Verifizierung des in Kapitel 4 vorgestellten Inversionsprogramms *IP3DInv_{DC}* wurde das Programm *For3DIP* zur Erzeugung synthetischer Daten entwickelt. *For3DIP* basiert auf dem 3D Finite-Differenzen-Algorithmus von Spitzer (1995) zur Gleichstromwiderstands-Modellierung, welcher auch in *IP3DInv_{DC}* implementiert ist. In Kapitel 3.1 wird die der Vorwärtsrechnung zugrunde liegende Theorie erläutert. Zudem werden der Aufbau des Algorithmus *For3DIP* skizziert und die Formeln zur Berechnung der analytischen Lösung eines homogenen Halbraums im Zeitbereich eingeführt. Für eine genauere Beschreibung des Programms *For3DIP* und seine Anwendung sei auf das Manual in D.2 verwiesen. Synthetische Studien mit verschiedenen Widerstandsmodellen des Untergrundes werden in Kapitel 3.2 vorgestellt und diskutiert. Abschließend werden die wichtigsten Schlussfolgerungen in Bezug auf die Inversion von Felddaten in Kapitel 3.2.3 zusammengefasst.

3.1. Theorie der verwendeten Vorwärtsrechnung

Im Folgenden wird die der Vorwärtsrechnung zugrunde liegende Theorie vorgestellt. Da *For3DIP* auf dem 3D Finite-Differenzen-Algorithmus von Spitzer (1995) basiert, folgt dieser Abschnitt diesem und zu großen Teilen der in diesem verwendeten Nomenklatur.

3.1.1. Berechnung des zeitabhängigen Widerstands basierend auf einem Frequenzbereichs-Modell

Die Berechnung des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ eines polarisierbaren Untergrunds basierend auf einem Frequenzbereichs-Modell (z.B. Cole-Cole-Modell), kann unter anderem aufgrund der Transformation vom Frequenz- in den Zeitbereich zu

Schwierigkeiten führen. Nach Guptasarma (1982) kann dies umgangen werden, indem ein digitaler Filter genutzt wird. Der im Rahmen des Programms verwendete Filter wurde speziell für komplexe Impedanz-Funktionen, welche beidseitig asymptotisch gegen reelle Grenzwerte konvergieren, entwickelt. Die Funktion sollte gleichmäßig fallend und frei von Resonanzpeaks sein, d.h. differenzierbar, stetig und monoton. In Tabelle 3.1 sind die Abszissenwerte α_r und Filterkoeffizienten ζ_r des verwendeten Filters für 21 Kreisfrequenzen ω_r aufgelistet.

Tabelle 3.1.: Abszissenwerte und Filterkoeffizienten des verwendeten Filters nach Guptasarma (1982).

r	α_r	ζ_r	r	α_r	ζ_r	r	α_r	ζ_r
1	-3.82704	0.000349998	8	-2.00032	0.003844944	15	-0.1736	0.234486236
2	-3.56608	-0.000418371	9	-1.73936	0.00680904	16	0.08736	0.366178323
3	-3.30512	0.000772828	10	-1.4784	0.013029162	17	0.34832	0.284615486
4	-3.04416	-0.000171356	11	-1.21744	0.022661391	18	0.60928	-0.235691746
5	-2.7832	0.001022172	12	-0.95648	0.042972904	19	0.87024	0.046994188
6	-2.52224	0.000897638	13	-0.69552	0.075423603	20	1.1312	-0.005901946
7	-2.26128	0.002208974	14	-0.43456	0.139346367	21	1.39216	0.000570165

Für das Cole-Cole Modell eines homogenen Halbraums hat die Übertragungsfunktion $\rho(\omega)$ die Form

$$\rho(\omega) = \rho_{dc} \left(1 - m \left[1 - \frac{1}{1 + (i\omega\tau)^c} \right] \right) \quad (3.1)$$

mit der Kreisfrequenz ω , dem Gleichstromwiderstand ρ_{dc} , der Aufladbarkeit m , der Relaxationszeit τ und dem Frequenzexponenten c . Der zeitabhängige Widerstand $\rho(t)$, welcher als der Kehrwert der zeitabhängigen Leitfähigkeit $\sigma(t)$ definiert ist, eines bestimmten Zeitpunktes t einer bestimmten Zelle l wird über die Summe des Realteils der Übertragungsfunktion $\rho(\omega)$ für $r = 1$ bis 21 berechnet

$$\rho_l(t) = \sum_{r=1}^{21} \zeta_r \Re [\rho_l(\omega_r)] . \quad (3.2)$$

Dabei ist die Kreisfrequenz ω_r über die Abszissenwerte α_r und die Zeit t definiert

$$\omega_r = 10^{(\alpha_r - \log_{10} t)} . \quad (3.3)$$

3.1.2. Grundgleichung der Gleichstromgeoelektrik

Ausgehend von den Maxwell Gleichungen (3.4) - (3.7), welche das elektromagnetische Feld beschreiben, wird im Folgenden die Grundgleichung der Geoelektrik hergeleitet.

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} \quad (3.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3.5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.6)$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}) = q \quad (3.7)$$

Das Ampèresche Gesetz (3.4) beschreibt die Verbindung zwischen dem magnetischen Wirbelfeld und dem Strom über die magnetische Feldstärke \mathbf{H} und die elektrische Stromdichte \mathbf{J} . Das Faraday'sche Induktionsgesetz (3.5) setzt das induzierte elektrische Feld mit der zeitlichen Ableitung der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} über die elektrische Feldstärke \mathbf{E} in Verbindung. Die Quelfreiheit des Feldes der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} wird durch das Gauß'sche Gesetz für Magnetfelder (3.6) ausgedrückt. Die Quelle elektrischer Feldlinien ist die elektrische Ladung. Das Gauß'sche Gesetz (3.7) beschreibt dies über die Dielektrizitätskonstante ε , die elektrische Feldstärke \mathbf{E} und die elektrische Raumladungsdichte q .

In der Gleichstromgeoelektrik ist \mathbf{E} zeitlich unabhängig, so dass aus Gleichung (3.5) die Wirbelfreiheit von \mathbf{E} folgt und dieses aus einem skalaren elektrischen Potential V abgeleitet werden kann

$$\mathbf{E} = -\nabla V. \quad (3.8)$$

Die elektrische Stromdichte \mathbf{J}

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_l + \mathbf{J}_s + \mathbf{J}_\nu. \quad (3.9)$$

setzt sich aus der Leitungsstromdichte \mathbf{J}_l nach dem Ohmschen Gesetz

$$\mathbf{J}_l = \sigma \mathbf{E}, \quad (3.10)$$

der Quellstromdichte $\mathbf{J}_s = \mathbf{d} \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ mit der Dirac-Funktion δ und der Verschiebungsstromdichte $\mathbf{J}_\nu = \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$ zusammen. Hierbei ist \mathbf{d} das Strommoment einer elektrischen Quelle am Ort \mathbf{r}_0 . Unter Berücksichtigung der Quelfreiheit des Gesamtstroms \mathbf{J} (d.h. $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$), welche aus Gleichung (3.4) folgt, und der Vernachlässigung

der Verschiebungsströme folgt aus Gleichung (3.9)

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_l = \nabla \cdot (\sigma \mathbf{E}) = -\nabla \mathbf{J}_s. \quad (3.11)$$

Mit Gleichung (3.8) folgt nach Berktold et al. (2005) aus Gleichung (3.11) die Gleichstrom-Grundgleichung

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla V) = \nabla \mathbf{J}_s. \quad (3.12)$$

Bei einem eingespeisten Strom mit der Stärke I am Ort \mathbf{r}_0 gilt:

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla V) = -I \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (3.13)$$

3.1.3. Berechnung der Modelle verschiedener Zeitpunkte mittels einer Näherung

Für eine komplexe, frequenzabhängige Leitfähigkeit $\sigma(\omega, \mathbf{r})$ wird Gleichung (3.13) zu

$$\nabla \cdot (\sigma(\omega, \mathbf{r}) \mathbf{E}(\omega, \mathbf{r})) = I \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) H(\omega) \quad (3.14)$$

oder ausgedrückt über den Kehrwert der Leitfähigkeit den komplexen, frequenzabhängigen Widerstand $\rho(\omega, \mathbf{r})$

$$\nabla \cdot \frac{\mathbf{E}(\omega, \mathbf{r})}{\rho(\omega, \mathbf{r})} = I \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) H(\omega) \quad (3.15)$$

mit der Frequenzabhängigkeit des Sendestroms $H(\omega)$. Für eine exakte Berechnung im Zeitbereich muss Gleichung (3.15) Fourier-transformiert werden zu

$$\nabla \cdot (\sigma(t, \mathbf{r}) * \mathbf{E}(t, \mathbf{r})) = I \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) H(t) \quad (3.16)$$

mit einer Konvolution der Leitfähigkeit mit dem elektrischen Feld und der Heaviside-Funktion $H(t)$.

Die exakte Berechnung der zeitabhängigen Widerstände setzt eine Berechnung im Frequenzbereich mit anschließender Transformation in den Zeitbereich voraus, welche eine unabhängige Berechnung für einzelne Zeitpunkte verhindert. Yuval and Oldenburg (1997) umgehen dies, indem sie eine Näherung zur unabhängigen Berechnung der einzelnen Zeitpunkte nutzen

$$\nabla \cdot (\sigma(t, \mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{E}}(t, \mathbf{r})) = I \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) H(t). \quad (3.17)$$

Wobei $\hat{\mathbf{E}}$ das genäherte, elektrische, zeitabhängige Feld kennzeichnet. Die Gültigkeit dieser Näherung, welche die Konvolution durch eine Multiplikation ersetzt, wird von Hördt et al. (2006) und Hönig and Tezkan (2007) in bis zu drei Dimensionen gezeigt.

Im Falle eines homogenen Halbraums, wo der Leitfähigkeitsgradient verschwindet ($\rho(t, \mathbf{r}) = \rho(t)$), gibt die Näherung (3.17) die exakte Lösung wieder. Ausgehend von Gleichung (3.17) erhält man unter Verwendung der Kausalität von $\rho(t)$

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{E}}(t, \mathbf{r}) = I\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) H(t)\rho(t) = I\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \rho(t). \quad (3.18)$$

Faltet man nun beide Seiten mit $\sigma(t)$ und nutzt die Beziehung $\rho(t) * \sigma(t) = H(t)$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \hat{\mathbf{E}}(t, \mathbf{r}) * \sigma(t) &= I\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) H(t)\rho(t) = I\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \rho(t) * \sigma(t) \\ \nabla \cdot (\sigma(t) * \hat{\mathbf{E}}(t, \mathbf{r})) &= I\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) H(t) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Für einen homogenen Halbraum entspricht das genäherte, elektrische Feld $\hat{\mathbf{E}}(t, \mathbf{r})$ der exakten Lösung des elektrischen Felds $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ aus Gleichung (3.16). Das elektrische Potential an der Oberfläche eines homogenen Halbraums lässt sich somit exakt und unabhängig für die einzelnen Zeitpunkte mit

$$V(\mathbf{r}) = \frac{I\rho}{2\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \quad (3.20)$$

berechnen. Die in Kapitel 3.2.1 genutzten analytischen Potentiale wurden mit Gleichung (3.20) berechnet.

3.1.4. Diskretisierung der partiellen Differentialgleichung

Aus Gleichung (3.13) folgt mit der Leitfähigkeit als skalare Funktion des Raums die Differentialgleichung des elektrischen Potentials einer beliebigen Leitfähigkeitsverteilung in einem Halbraum

$$\begin{aligned} \sigma \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial \sigma}{\partial x} \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial \sigma}{\partial y} \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial \sigma}{\partial z} \frac{\partial V}{\partial z} \\ = -I\delta(x - x_q) \delta(y - y_q) \delta(z - z_q). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Diese Differentialgleichung muss numerisch gelöst werden, da es nur für wenige einfache Leitfähigkeitsverteilungen analytische Lösungen gibt. In Abbildung 3.1 ist das genutzte dreidimensionale Finite-Differenzen (FD) Gitter skizziert. Bezogen auf den, mit einem Punkt markierten, Gitterpunkt (i, j, k) sind benachbarte Gitter-

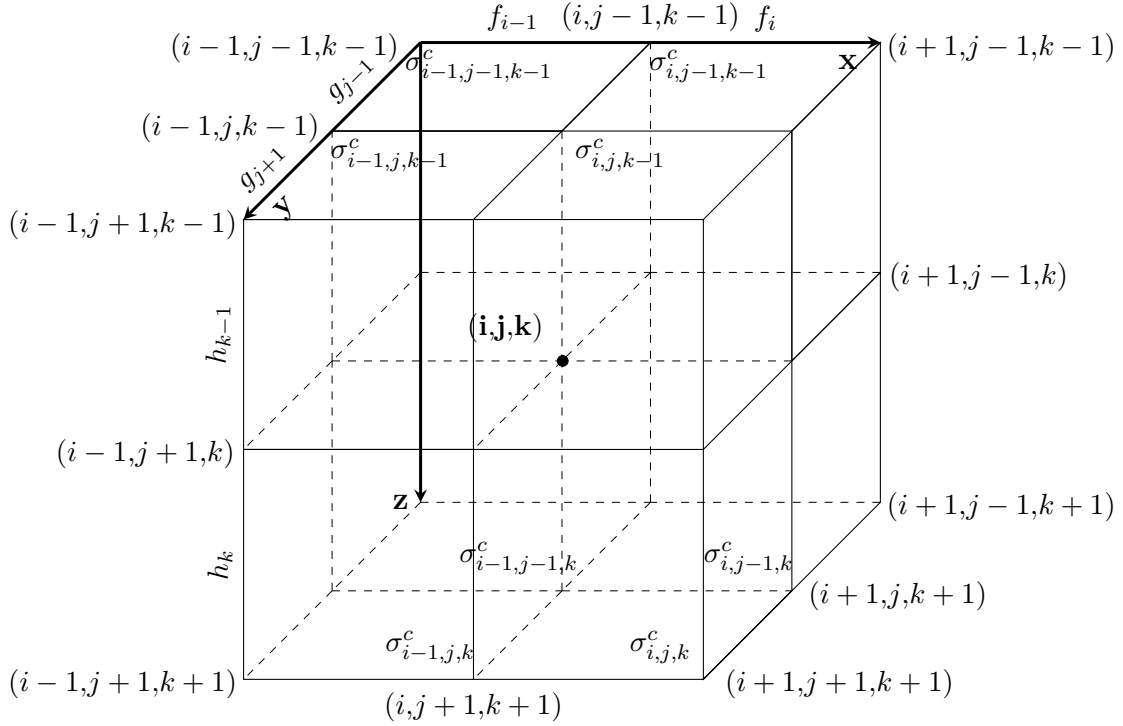


Abbildung 3.1.: Skizziert ist das dreidimensionale Finite-Differenzen-Gitter zur Veranschaulichung der Nutzung der Indizes (i, j, k) , Zelleitfähigkeiten $(\sigma_{i,j,k}^c)$ und Gitterpunktständen (f, g, h) (verändert nach Spitzer, 1995).

punkte, Zelleitfähigkeiten $\sigma_{i,j,k}^c$ und Gitterpunktstände (f_i, g_j, h_k) gekennzeichnet. Die Indizes laufen dabei für die Gitterpunkte über $i = 1, \dots, i_m$, $j = 1, \dots, j_m$ und $k = 1, \dots, k_m$. Das Gitter enthält insgesamt a_z Zellen und a_p Gitterparameter.

Die Diskretisierung der Leitfähigkeitsverteilung ist entscheidend, um akkurate Ergebnisse zu erhalten. Das genaue Vorgehen wird ausführlich in Spitzer (1995) erklärt und wird im Folgenden der Vollständigkeit halber grundsätzlich erläutert. Die Leitfähigkeit $\sigma_{i,j,k}$ an dem Gitterpunkt (i, j, k) wird über das arithmetische Mittel der volumen-gewichteten Zelleitfähigkeiten $s_{i,j,k} = f_i g_j h_k \sigma_{i,j,k}^c$ der acht angrenzenden Zellen berechnet

$$\begin{aligned} \sigma_{i,j,k} = & \frac{s_{i,j,k} + s_{i-1,j,k} + s_{i,j-1,k} + s_{i,j,k-1}}{(f_{i-1} + f_i)(g_{j-1} + g_j)(h_{k-1} + h_k)} \\ & + \frac{s_{i-1,j-1,k} + s_{i-1,j,k-1} + s_{i,j-1,k-1} + s_{i-1,j-1,k-1}}{(f_{i-1} + f_i)(g_{j-1} + g_j)(h_{k-1} + h_k)}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Auch die Berechnung der Leitfähigkeitsgradienten an den Gitterpunkten erfolgt über die volumen-gewichteten Zellleitfähigkeiten $s_{i,j,k}$

$$\left. \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right|_{i,j,k} = \alpha \left(\frac{s_{i,j,k} + s_{i,j,k-1} + s_{i,j-1,k} + s_{i,j-1,k-1}}{f_i} - \frac{s_{i-1,j,k} + s_{i-1,j,k-1} + s_{i-1,j-1,k} + s_{i-1,j-1,k-1}}{f_{i-1}} \right) \quad (3.23)$$

mit $\alpha = \frac{2}{(f_{i-1}+f_i)(g_{j-1}+g_j)(h_{k-1}+h_k)}$ bezüglich x und wird analog bezüglich y und z durchgeführt. Die Kopplungskoeffizienten der Gitterpunkte $c1_{i,j,k}$ bis $c6_{i,j,k}$ und der Selbstkopplungskoeffizient $c0_{i,j,k}$ sind über die Leitfähigkeiten an den Gitterpunkten und die Gitterzellenabstände definiert

$$\begin{aligned} c1_{i,j,k} &= \frac{2\sigma_{i,j,k} - \frac{\partial \sigma_{i,j,k}}{\partial x} f_i}{f_{i-1}(f_{i-1} + f_i)} & c2_{i,j,k} &= \frac{2\sigma_{i,j,k} - \frac{\partial \sigma_{i,j,k}}{\partial x} f_{i-1}}{f_i(f_{i-1} + f_i)} \\ c3_{i,j,k} &= \frac{2\sigma_{i,j,k} - \frac{\partial \sigma_{i,j,k}}{\partial y} g_j}{g_{j-1}(g_{j-1} + g_j)} & c4_{i,j,k} &= \frac{2\sigma_{i,j,k} - \frac{\partial \sigma_{i,j,k}}{\partial y} g_{j-1}}{g_j(g_{j-1} + g_j)} \\ c5_{i,j,k} &= \frac{2\sigma_{i,j,k} - \frac{\partial \sigma_{i,j,k}}{\partial z} h_k}{h_{k-1}(h_{k-1} + h_k)} & c6_{i,j,k} &= \frac{2\sigma_{i,j,k} - \frac{\partial \sigma_{i,j,k}}{\partial z} h_{k-1}}{h_k(h_{k-1} + h_k)} \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$c0_{i,j,k} = - \sum_{l=1}^6 cl_{i,j,k}. \quad (3.25)$$

Die rechte Seite in Gleichung (3.21), der Quellterm Q , kann über die elektrische Stromstärke I und ein finites Quelltermelement τ_q ausgedrückt werden

$$Q = I\delta(x - x_q)\delta(y - y_q)\delta(z - z_q) \approx \frac{I}{\tau_q}. \quad (3.26)$$

Befindet sich der Sender oberhalb der Oberfläche erhält man

$$\tau_q = \frac{(f_{i_q-1} + f_{i_q})(g_{j_q-1} + g_{j_q})h_1}{8}. \quad (3.27)$$

Substituiert man die diskretisierten Terme in Gleichung (3.21) erhält man die FD Gleichung für das Potential V am Punkt (i, j, k)

$$\begin{aligned} c1_{i,j,k}V_{i-1,j,k} + c2_{i,j,k}V_{i+1,j,k} + c3_{i,j,k}V_{i,j-1,k} + c4_{i,j,k}V_{i,j+1,k} + \\ c5_{i,j,k}V_{i,j,k-1} + c6_{i,j,k}V_{i,j,k+1} = c0_{i,j,k}V_{i,j,k} - Q \end{aligned} \quad (3.28)$$

mit

$$Q = \begin{cases} 0 & \text{für } (i, j, k) \neq \text{Sendepunkt} \\ I/\tau_q & \text{für } (i, j, k) = \text{Sendepunkt.} \end{cases} \quad (3.29)$$

Die Kopplungskoeffizienten in Gleichung (3.24) sind nur für Gitterpunkte definiert, welche im Inneren des Gitters liegen und sechs Nachbarpunkte haben. An den Gittergrenzen müssen diese entsprechend der gewählten Bedingung modifiziert werden. An der Erde-Luft Grenze ist entsprechend der Neumann Bedingung ($\partial V/\partial z = 0$) die Normalkomponente der Leitungsstromdichte \mathbf{J}_1 Null außer an den Quellpunkten:

$$c5_{i,j,1} = 0 \quad c6_{i,j,1} = \frac{2\sigma_{i,j,1}}{h_1^2}. \quad (3.30)$$

Entsprechend der Dirichlet Bedingung ($V = 0$) werden die Kopplungskoeffizienten der anderen Gittergrenzen gleich Null gesetzt

$$\begin{aligned} c1_{1,j,k} &= 0 & c2_{i_m,j,k} &= 0 \\ c3_{i,1,k} &= 0 & c4_{i,j_m,k} &= 0 \\ c6_{i,j,k_m} &= 0. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Das Lineare Gleichungssystem

Ein System von FD Gleichungen kann geschrieben werden als

$$\mathbf{A}\mathbf{V} = \mathbf{b}. \quad (3.32)$$

Die Kopplungskoeffizientenmatrix \mathbf{A} und der Quelltermvektor \mathbf{b} sind gegeben und der Potentialvektor \mathbf{V} wird gesucht. Die Kopplungskoeffizientenmatrix \mathbf{A} ist nicht symmetrisch, so dass sie zur Nutzung der konjugierten Gradienten Methode in eine symmetrische Form gebracht werden muss (siehe Kapitel D.3.4). Durch die beidseitige Multiplikation mit der Transformationsmatrix \mathbf{K} erhält man ein zu Gleichung (3.32) äquivalentes System von Gleichungen

$$\mathbf{K}\mathbf{A}\mathbf{V} = \mathbf{K}\mathbf{b}. \quad (3.33)$$

Zum Lösen des Gleichungssystems wird die Prekonditionierte Konjugierte Gradient Methode (CGPC) nach Schwarz (1991) angewendet. Die Methode wird als SSOR-Preconditioning (Symmetric Successiv Overrelaxtion) bezeichnet. Die symmetrische, skalierte Kopplungskoeffizientenmatrix $\mathbf{K}\mathbf{A}$ kann als Summe einer unteren Dreiecksmatrix \mathbf{E} , einer oberen Dreiecksmatrix $\mathbf{F} = \mathbf{E}^T$ und einer Einheitsmatrix \mathbf{I} geschrieben werden

$$\mathbf{K}\mathbf{A} = \mathbf{E} + \mathbf{I} + \mathbf{F} \quad (3.34)$$

Die Vorkonditionierungsmatrix \mathbf{M} wird mittels der Matrix \mathbf{C} berechnet, welche sich aus den von Null verschiedenen Einträgen des unteren Dreiecks von $\mathbf{K}\mathbf{A}$ zusammen-

setzt. ϖ bezeichnet einen Relaxationsfaktor und ist Element der reellen Zahlen

$$\begin{aligned}\mathbf{M} &= \mathbf{C}\mathbf{C}^T \\ &= (\mathbf{I} + \varpi\mathbf{E})(\mathbf{I} + \varpi\mathbf{F}).\end{aligned}\tag{3.35}$$

Für den Potentialvektor \mathbf{V} wird ein Startvektor angenommen und dieser iterativ angepasst. Dies geschieht in einem dreistufigen Prozess, welcher das Residual \mathbf{r}_L minimiert, eine neue Suchrichtung \mathbf{p}_L und den Potentialvektor \mathbf{V}_L berechnet. In jeder Iteration wird das Gleichungssystem mit dem Gradienten der Suchrichtung \mathbf{g}_L

$$\mathbf{M}\mathbf{g}_L = \mathbf{r}_L\tag{3.36}$$

mittels der Gauss Methode gelöst. Aufgrund der speziellen Wahl von \mathbf{M} als Produkt einer unteren und oberen Dreiecksmatrix, lässt sich die Hin- und Rücktransformation der Gauss Methode leicht durchführen. Aus Gründen der Äquivalenz wird der Potentialvektor \mathbf{V} nach dem Lösen des Gleichungssystems ebenfalls mit einem Skalierungsfaktor multipliziert. Die genaue Umsetzung der beschriebenen Vorgehensweise wird in Anhang D.3 erläutert.

3.1.5. Berechnung des synthetischen Transienten einer Sender-Empfänger-Kombination

Für eine gegebene Verteilung der IP-Parameter ρ_{dc} , m , τ und c im Untergrund wird für jede Modellzelle gemäß Gleichung (3.2) der zeitabhängige Widerstand der Zelle berechnet. Für eine Empfängerkombination rx_{ij} wird die Potentialdifferenz ΔV für jeden Zeitpunkt t basierend auf dem zeitabhängigen Widerstandsmodell des Untergrunds berechnet

$$\Delta V(rx_{ij}, t) = |V(rx_i, t) - V(rx_j, t)|.\tag{3.37}$$

Unter Verwendung der Näherung (3.17) kann die Potentialdifferenz jedes Zeitpunkts unabhängig von denen der anderen Zeitpunkte berechnet werden. Die so berechneten synthetischen zeitabhängigen Potentialdifferenzen aller Zeitpunkte werden als synthetischer Transient der Sender-Empfänger-Kombination bezeichnet. Die synthetischen Transienten können mit gemessene Transient, welche als Zeitreihe aufgezeichnet wurden, verglichen werden.

Nach dem Ohmschen Gesetz (3.10) kann aus der Potentialdifferenz zwischen den Sonden M und N und der Stromstärke zwischen den Elektroden A und B der elektrische Widerstand bestimmt werden (siehe Abbildung 2.7). Handelt es sich um einen

inhomogenen Untergrund wird der scheinbare spezifische Widerstand ρ_a bestimmt. Für einen homogenen Untergrund lässt sich mit dem Konfigurationsfaktor k der Sender-Empfänger-Kombination, auch als Geometriefaktor bezeichnet, der wahre spezifische Widerstand bestimmen

$$\Delta V(t) = \rho(t)I \underbrace{\left[\frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_3} + \frac{1}{r_4} \right) \right]}_{k\text{-Faktor}}. \quad (3.38)$$

Der Abstand der Elektrode A zur Sonde M wird mit r_1 und der zur Sonde N mit r_2 bezeichnet. Analog ist r_3 der Abstand der Elektrode B zur Sonde M und r_4 der von B zu N. Der Geometriefaktor k ist negativ, wenn sich der Potentialdipol außerhalb des Stromdipols befindet. Dies ist für Dipol-Dipol-Auslagen der Fall und im Falle der verwendeten Gradientenauslage für einzelne Empfangsdipole (siehe Abbildung 5.2.1).

Die Positionen der Sender- und Empfängerpositionen kann bei einer Vierpunktanordnung nach Berktold et al. (2005) vertauscht werden. Das Reziprozitätsprinzip wird sowohl zu Kontrollzwecken, zur Verbesserung des Signal-zu-Rausch-Verhältnis bei Messungen mit Mehrelektrodensystemen als auch zur Berechnung der Sensitivitäten in der Inversion mit *IP3DInv_{DC}* (siehe Kapitel 4.11) genutzt.

3.2. Modellstudien mit For3DIP

Mit dem Programm *For3DIP* wurden Studien mit verschiedenen Modellen eines polarisierbaren Untergrunds durchgeführt. Zur besseren Übertragung der gewonnenen Erkenntnisse auf die Inversion und Interpretation der Felddaten in Kapitel 5 wurde für alle synthetischen Studien die in Krauthausen verwendete Messauslage genutzt (siehe Abbildung 3.2).

Für 269 Senderpositionen mit je 7 Empfängern wurden insgesamt 1883 Transienten für den Einschaltvorgang berechnet, welche aus je 39 Zeitpunkten in logarithmisch äquidistanten Abständen von 10 bis 3414 ms bestehen. Als Auslage wurde die Gradientenauslage verwendet, welche in Abbildung 2.12 skizziert ist. Das verwendete Gitter besteht aus 49 Zellen in x-, 24 in y- und 19 in z-Richtung und ist ebenfalls identisch mit dem für die Inversion verwendeten Gitter aller gezeigter Inversionen im Rahmen der vorliegenden Arbeit. Die Größe ei-

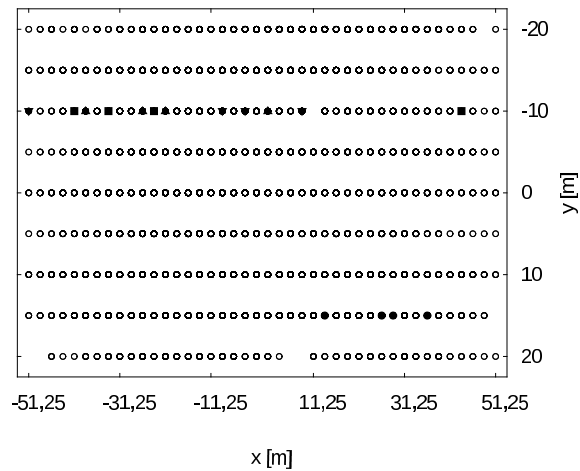
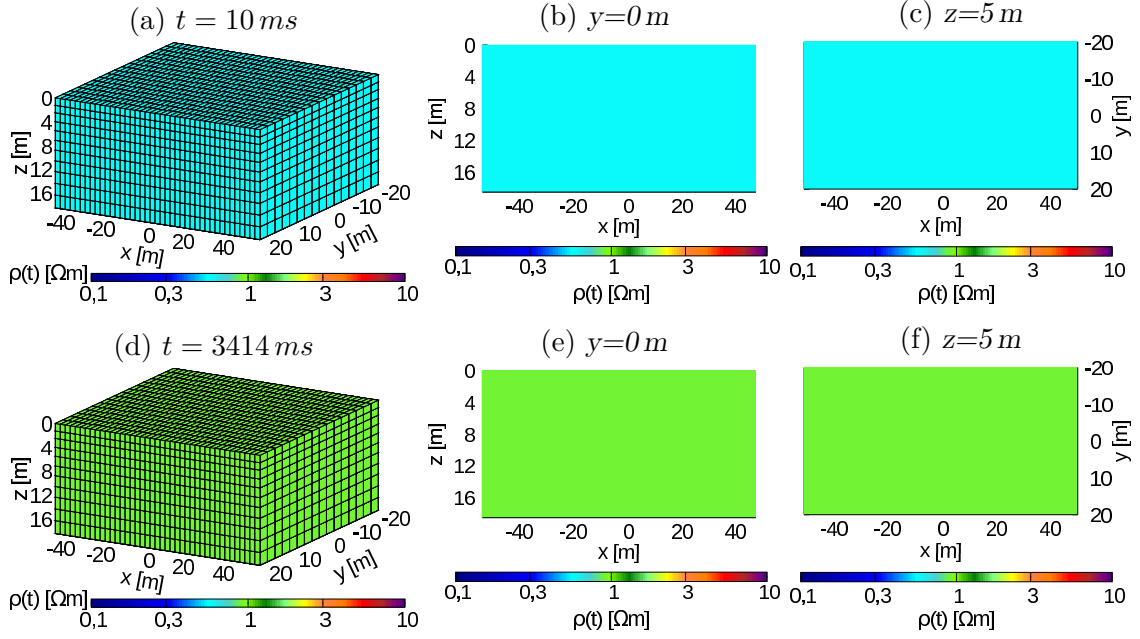


Abbildung 3.2.: *Verwendete Elektrodenpositionen für die Modellstudien und Messung in Krauthausen. Die Elektrodenpositionen der in Kapitel 3.2.1 verwendeten Transienten sind mit ausgefüllten Symbolen markiert (1. ■, 10. ▼, 100. ▲, 1883. ●).*

ner Gitterzelle in x-Richtung entspricht mit 2,5 m dem Elektrodenabstand und ist identisch mit der Gitterzellengröße in y-Richtung. Zur Erfüllung der Randbedingungen in Gleichung (3.30) und Gleichung (3.31) sind die Randzellen in x- und y-Richtung als sehr große Vielfache des Elektrodenabstands gewählt. In z-Richtung vergrößert sich die Zellengröße beginnend mit einem halben Elektrodenabstand exponentiell. Im Folgenden werden ausgewählte Studien für einen homogenen Halbraum und ein Blockmodell vorgestellt. Es findet zudem ein Vergleich mit analytisch berechneten Werten statt.

3.2.1. Homogener Halbraum

Für polarisierbare, homogene Halbräume mit Gleichstromwiderstandswerten von 1, 10, 100 und 1000 Ωm wurden synthetische Transienten berechnet und mit der analytischen Lösung für ausgewählte Zeitpunkte verglichen. Aufgrund der Konsistenz der Ergebnisse wird im Rahmen dieser Arbeit nur die Studie des Halbraums mit 1 Ωm vorgestellt. Aus der Differenz der analytischen und synthetischen Potential-



Abbildungung 3.3.: Dargestellt ist die berechnete Verteilung des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ im Untergrund für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms (a - c) und für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms (d - f). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5\text{ m}$. Das IP-Modell ist ein homogener Halbraum mit $\rho = 1\text{ }\Omega\text{m}$, $m=500\frac{\text{mV}}{\text{V}}$, $\tau=0,5\text{ s}$ und $c=0,5$.

differenzen für verschiedene Widerstandswerte wird ein grundsätzlicher, gitterbedingter Fehler abgeschätzt, welcher für Inversionen mit $IP3DInv_{DC}$ genutzt werden kann.

Aufgrund der Zeitabhängigkeit des Widerstands $\rho(t)$ nimmt dieser für die einzelnen Zeitpunkte je nach Wahl des Gleichstromwiderstands ρ_{dc} , der Aufladbarkeit m , der Relaxationszeit τ und des Frequenzexponenten c gemäß der Cole-Cole-Formel (3.1) verschiedene Werte an. In Abbildung 3.3 ist die zeitabhängige Widerstandsverteilung des Untergrundes für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms und den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms dargestellt. Berechnet wurden die zeitabhängigen Widerstände für einen homogenen Untergrund mit $\rho = 1\text{ }\Omega\text{m}$, $m=500\frac{\text{mV}}{\text{V}}$, $\tau=0,5\text{ s}$ und $c=0,5$. In der ersten Spalte ist der innere Bereich des Gitters von $-51,25\text{ m}$ bis $51,25\text{ m}$ in x -Richtung, 20 m bis -20 m in y -Richtung und bis zu einer Tiefe von $18,5\text{ m}$ in z -Richtung abgebildet. Vertikale Schnitte bei $y=0\text{ m}$ finden sich in der zweiten Spalte und horizontale Tiefenschnitte bei $z=5\text{ m}$ in der dritten Spalte. Die Abnahme des Widerstands für den ersten Zeitpunkt auf $0,571\text{ }\Omega\text{m}$, was einer Abnahme auf $57,1\%$ des Gleichstromwiderstands ρ_{dc} entspricht, ist gut zu erkennen. Der Widerstand des letzten Zeitpunkts liegt mit einem Wert von $0,899\text{ }\Omega\text{m}$ nahe $1\text{ }\Omega\text{m}$, aber erreicht den Gleichstromwiderstand nicht. Mit einer Differenz zwi-

schen dem zeitabhängigen Widerstand des letzten und dem des ersten Zeitpunkts von 36,48% weist der Transient eine deutliche Dynamik auf.

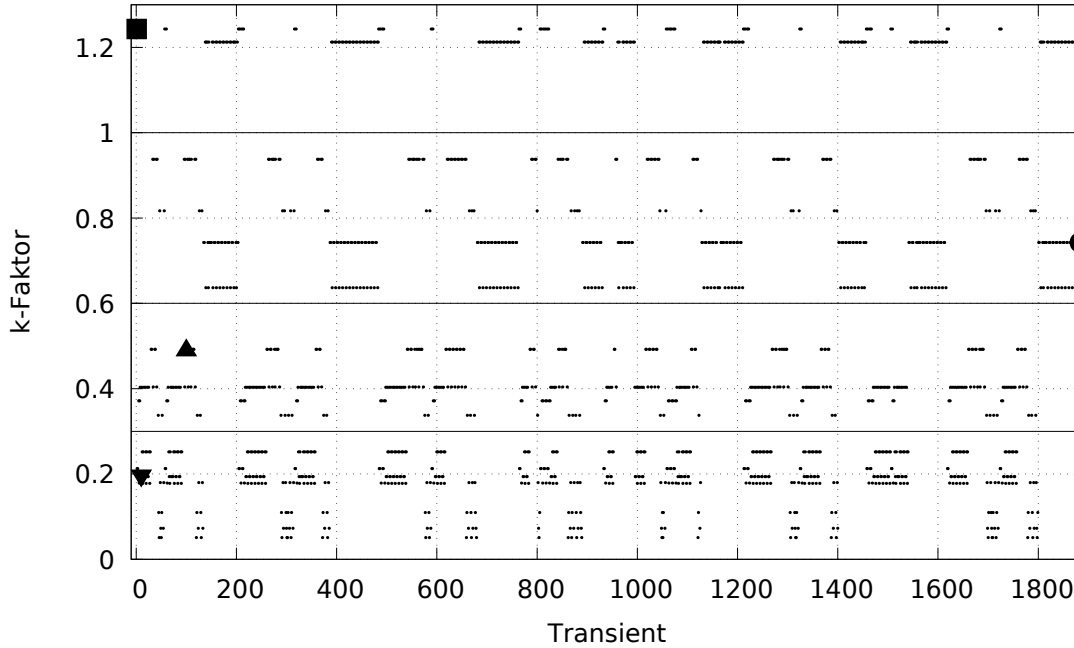
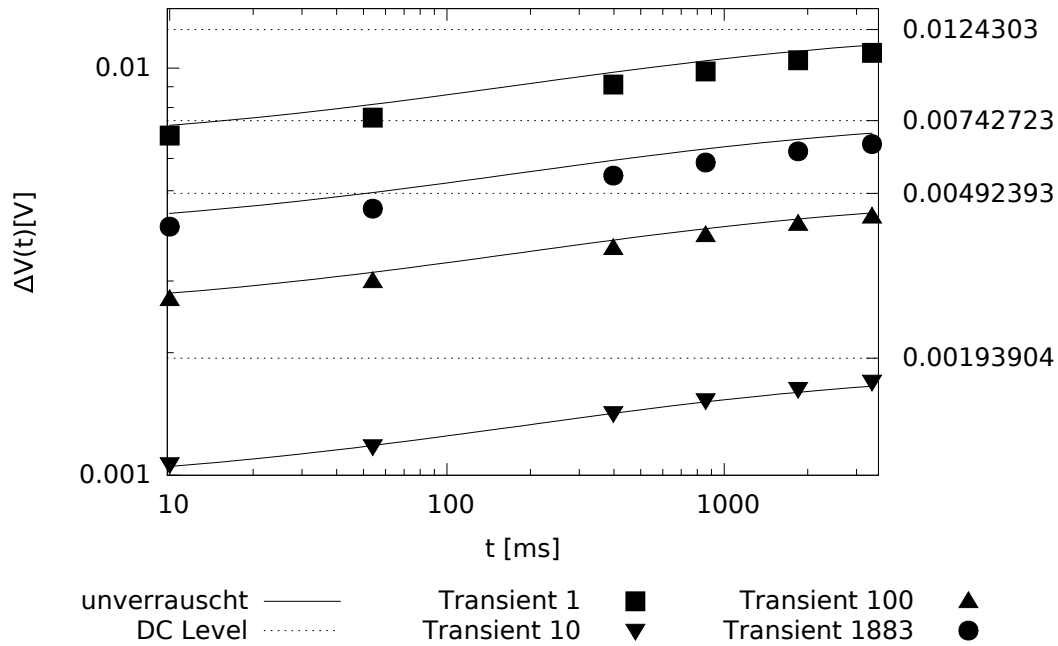


Abbildung 3.4.: Aufgetragen ist der Betrag des k -Faktors gegen die Transientennummer aller verwendeten Sender-Empfänger-Kombinationen. Diese sind in 4 Gruppen unterteilt. Besonders gekennzeichnet sind der 1. ■, 10. ▼, 100. ▲ und 1883. ● Transient. Linien trennen die Gruppen A, B, C und D.

Für die durchgeführten Studien wurden die verwendeten Sender-Empfänger-Kombinationen entsprechend des Betrags ihres Geometriefaktors k in 4 Gruppen unterteilt (siehe Abbildung 3.4). Aus Gründen der Übersicht wird im Folgenden je ein repräsentativer Transient der entsprechenden Gruppe vorgestellt und die Durchschnittswerte der jeweiligen Gruppe angegeben. Während man für symmetrische Elektrodenkonfigurationen von einer Proportionalität der ungefähren Eindringtiefe und des k -Faktors ausgehen kann, ist diese Näherung für unsymmetrische Auslagen, wie die verwendete Gradientenauslage, nicht erfüllt. Ähnliche Geometriefaktoren kennzeichnen für die Gradientenauslage ähnliche Elektrodenverteilungen der einzelnen Sender-Empfänger-Kombinationen und sind nicht mehr proportional zur Tiefe. Allerdings liegen die Eindringtiefen der Sender-Empfänger-Kombinationen innerhalb einer Gruppe näherungsweise in ähnlichen Bereichen und rechtfertigen somit eine Unterteilung entsprechend des Betrags des k -Faktors.

Die erste Gruppe A umfasst 557 Transienten, welche von Sender-Empfänger-Kombinationen aufgezeichnet wurden deren k -Faktor kleiner als 0,3 ist, und beinhaltet unter anderem den Transienten der 10. Sender-Empfänger-Kombination. Die 100. Sender-Empfänger-Kombination gehört zur zweiten Gruppe B, welche 375 Transi-

enten mit einem k-Faktor von 0,3 - 0,6 beinhaltet. Die dritte Gruppe C umfasst 406 Transienten mit einem k-Faktor von 0,6 - 1,0 und enthält die 1883. Sender-Empfänger-Kombination. Transienten aufgenommen mit einem k-Faktor größer als 1,0 sind in der vierten Gruppe D zusammengefasst. In dieser sind neben der ersten Sender-Empfänger-Kombination weitere 544 Transienten enthalten.



Abbildungung 3.5.: Die für den homogenen Halbraum berechneten Transienten der 1., 10., 100. und 1883. Sender-Empfänger-Kombination sind durch Linien dargestellt. Für jede Kombination ist der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} durch eine gestrichelte Linie gekennzeichnet. Für 10, 54, 398, 857, 1847 und 3414 ms sind zudem die analytisch berechneten zeitabhängigen Widerstände mit den entsprechenden Symbolen eingezeichnet.

In Abbildung 3.5 sind beispielhaft für vier ausgewählte Sender-Empfänger-Kombinationen (1., 10., 100. und 1883.) die Transienten dargestellt, welche einen repräsentativen Wertebereich für alle Kombinationen abdecken. Die Kombinationen 1, 10 und 100 befinden sich auf Profil 1, welches bei $y=-10$ m liegt, und Kombination 1883 liegt auf Profil 9, welches bei $y=15$ m liegt. Die unverrauschten Transienten sind mit durchgezogenen Linien und der jeweilige Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (DC-Level) mittels einer gestrichelten Linie gekennzeichnet. Die analytische Lösung für ausgewählte Zeitpunkte wurde mit Gleichung (3.20) berechnet und ist mit ausgefüllten Symbolen eingezeichnet. Es ist zu erkennen, dass sich die Transienten ρ_{dc} stets annähern, aber den Gleichstromwiderstand nicht erreichen. Normiert man die unverrauschten Transienten auf den jeweiligen k-Faktor, liegen diese wie für einen homogenen Halbraum erwartet übereinander.

Die prozentuale Abweichung der Potentialdifferenz zur analytische Lösung wurde für alle Transienten berechnet. Die Mittelwerte der vier Gruppen unterteilt nach dem Geometriefaktor finden sich für ausgewählte Zeitpunkte in Tabelle 3.2. Grundsätzlich ist die mittlere, prozentuale Abweichung von der analytischen Lösung für Sender-Empfänger-Kombinationen mit einem großen k-Faktor größer als für Kombinationen mit einem kleinen k-Faktor. Eine mögliche Ursache hierfür ist das recht grobe Gitter. Gruppe C zeigt eine erhöhte Abweichung in Bezug auf Gruppe D, was sich auf die große Anzahl der Dipol-Dipol ähnlichen Elektrodenkonfigurationen der Gruppe C zurückführen lässt. Bei gleicher maximaler Entfernung zwischen den äußeren Elektroden und ähnlicher Eindringtiefe ist der Geometriefaktor einer Dipol-Dipol ähnlichen Auslage betragsmäßig bedeutend kleiner als der einer Schlumberger ähnlichen Auslage. Sender-Empfänger-Kombinationen, welche auf Profilen weiter entfernt von der Gittermitte bezüglich $y=0$ liegen, weisen ebenfalls größere Abweichungen auf als Kombinationen die näher zur Gittermitte liegen. Die syn-

Tabelle 3.2.: *Gemittelte, prozentuale Abweichung der Potentialdifferenz zur analytischen Lösung für die vier Gruppen A - D und alle Transienten, der gewichtete Mittelwert für ausgewählte Zeitpunkte und der Mittelwert aller Zeitpunkte.*

Gruppe	3414 ms	1847 ms	857 ms	398 ms	54 ms	10 ms	Ø
A (inkl. 10.)	2,60%	2,59%	1,05%	0,21%	0,34%	1,31%	1,65%
B (inkl. 100.)	2,15%	2,85%	3,81%	4,68%	5,21%	3,70%	3,16%
C (inkl. 1883.)	6,31%	7,05%	8,04%	8,96%	9,52%	7,84%	7,23%
D (inkl. 1.)	4,59%	5,26%	6,22%	7,16%	7,71%	6,00%	6,85%
A-D (alle)	3,89%	4,38%	4,60%	5,00%	5,42%	4,55%	4,66%

thetischen Werte einzelner Zeitpunkte weichen minimal um 0,1% und maximal um 11% von den analytischen ab. Zur Berechnung der mittleren Abweichung aller Zeitpunkte aller Transienten wurden die Durchschnittswerte der einzelnen Gruppen mit ihrer Mitgliederzahl gewichtet. Es ergibt sich ein mittlere gewichtete Abweichung von 4,66%.

Zusammenfassung der synthetischen Studien des homogenen Halbraums

Die synthetischen Studien für den homogenen Halbraum im Wertebereich von 1 - 1000 Ωm zeigen ein konsistentes Verhalten über den gesamten Wertebereich. Die berechneten Transienten lassen sich durch Normierung auf den vorwärtsgerechneten Gleichstromwiderstand und den k-Faktor ineinander überführen. Auch die Dynamik und die prozentuale Abnahme des letzten Zeitpunkts relativ zum DC-Level sind gleich. Die Transienten weichen von der analytischen Lösung ab. Die mittlere Abweichung des Transienten für Sender-Empfänger-Kombination mit einem großen

Geometriefaktor ist grundsätzlich größer als für Kombinationen mit einem kleinen Geometriefaktor. Die Abweichung nimmt für größere Abstände zur Gittermitte zu und mit späten Zeiten grundsätzlich ab. Im Folgenden werden die Abweichungen zur analytischen Lösung jedoch grundsätzlich für alle Zeitpunkte aller Transienten mit einem Fehler von 5% berücksichtigt, welcher auf den gegebenenfalls vorhandenen Messfehler addiert wird.

3.2.2. Blockmodell

Zur Untersuchung des Einflusses dreidimensionaler Untergrundstrukturen auf Messdaten wurden verschiedene Blockmodelle vorwärtsgerechnet. Eine repräsentative Studie wird im Folgenden vorgestellt. Es soll eine Abschätzung über den Einfluss auf Daten von Profilen, welche nicht unmittelbar über den Blöcken liegen, sondern parallel zu diesen verlaufen, getroffen werden. Diese Abschätzung kann im Rahmen der Diskussion der Inversionsergebnisse mittels einer dreidimensionalen Inversion durch $IP3DInv_{DC}$ und $IP3DInv_{IP}$ und einer zweidimensionalen Inversion durch $RES2DINV$ in Kapitel 5.5.1 genutzt werden.

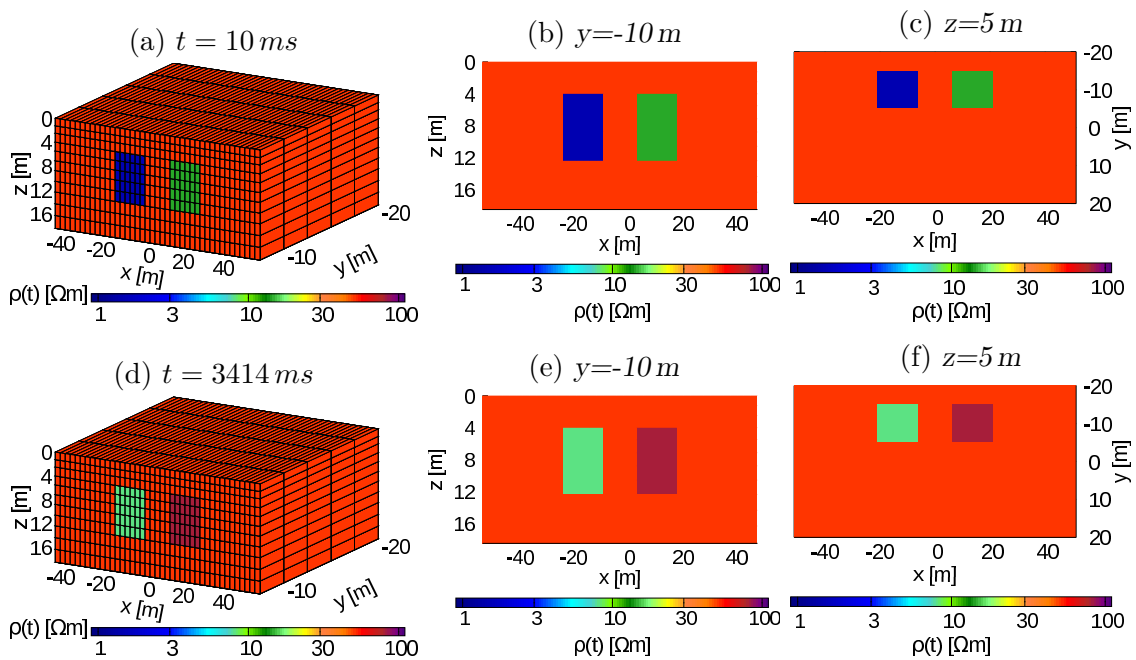


Abbildung 3.6.: Dargestellt ist die Verteilung des berechneten zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ im Untergrund für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms (a-c) und für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms (d-f). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Das zugrunde liegende IP-Modell ist in Tabelle 3.3 zu finden.

Der unpolarisierbare Gleichstromwiderstand des Hintergrundes $\rho_{dc,h}$ beträgt

Tabelle 3.3.: Parameter des IP-Modell für den Hintergrund und beide verwendeten Blöcke

	$\rho_{dc} [\Omega\text{m}]$	$m [\frac{\text{mV}}{\text{V}}]$	$\tau [\text{s}]$	c
Hintergrund (_h)	50	0	0	0
Linker Block (₁)	10	1000	0,5	0,5
Rechter Block (₂)	100	1000	0,5	0,5

50 Ωm . Eingebettet in diesem sind zwei polarisierbare blockförmige Störkörper mit einem Gleichstromwiderstand von 10 Ωm für den linken und 100 Ωm für den rechten Block. Die Aufladbarkeit beträgt 1000 $\frac{\text{mV}}{\text{V}}$, die Relaxationszeit und der Frequenzexponent beider Blöcke betragen 0,5. Der erste Block beginnt bei $x=-21,25\text{ m}$ und endet bei $x=-6,25\text{ m}$. In y -Richtung ist der Block von -5 m bis -15 m und in z -Richtung von 4 m bis $12,40\text{ m}$ ausgedehnt. Die y - und z -Ausdehnung des zweiten entsprechen denen des ersten Blocks. In x -Richtung ist der zweite Block von $6,25\text{ m}$ bis $21,25\text{ m}$ ausgedehnt. Das Untergrundmodell des zeitabhängigen Widerstands ist zwischen $y=-7,5\text{ m}$ und $y=-20\text{ m}$ in Abbildung 3.6 dargestellt.

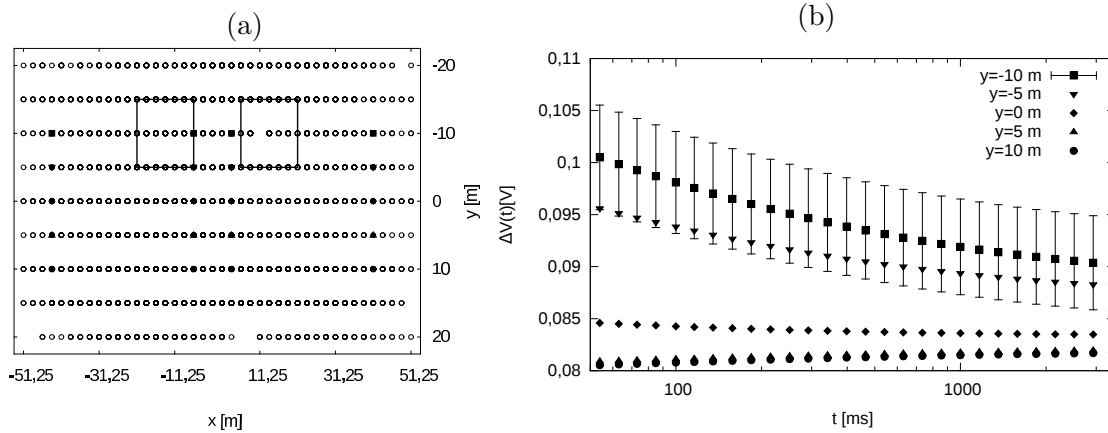


Abbildung 3.7.: In einer Aufsicht (a) sind alle genutzten Elektrodenkombinationen und die Lage der Blöcke gekennzeichnet, wobei die Positionen der großen Auslagen oberhalb beider Blöcke der in (b) gezeigten Transienten hervorgehoben sind. (b) Dargestellt sind die berechneten Potentialdifferenzen ΔV gegen die Zeit t . Für den Transienten der Sender-Empfänger-Kombination bei -10 m sind 5%ige Fehlerbalken eingezeichnet.

In Abbildung 3.7 sind für fünf ausgewählte Elektrodenkombinationen mit einer großen Auslage, welche mit einer Länge von 85 m die Ausdehnung beider Blöcke abdeckt, sowohl die Elektrodenpositionen (a) als auch die berechneten Transienten (b) dargestellt. Es werden beispielhaft fünf Transienten verglichen, welche auf fünf parallelen Profilen für identische Sender-Empfänger-Kombinationen berechnet wurden. Das Profil bei $y=-10\text{ m}$ schneidet beide Blöcke mittig und der berechnete Transi-

ent unterscheidet sich deutlich von den im Rahmen dieser Arbeit bisher gezeigten. Die Potentialdifferenzen aller untersuchten Sender-Empfänger-Kombinationen, welche mit ihrer Ausdehnung beide Blöcke abdecken und oberhalb dieser liegen, nehmen mit ansteigender Zeit ab. Dieses Verhalten zeigte sich bei den Studien stets, wenn die Sender-Empfänger-Kombination verschiedene voneinander entfernt liegende Blöcke überdeckte. Auch der für die bei $y=-5$ m oberhalb der Kante der Blöcke liegende Sender-Empfänger-Kombination berechnete Transient zeigt ein solches Verhalten. Der Wertebereich dieses Transienten liegt unterhalb des oben beschriebenen Transienten, aber innerhalb der Fehler von 5% ist eine Unterscheidung dieser Transienten nicht eindeutig möglich. Ab einer Distanz zur Kante der Blöcke von 5 m zeigen die Transienten der Auslagen bei 0, 5 und 10 m ein ähnliches, wenig dynamisches Verhalten. Relativ zum 5%igen Fehlerlevel ist kein deutlicher Einfluss der Blöcke auf die Form der Transienten erkennbar.

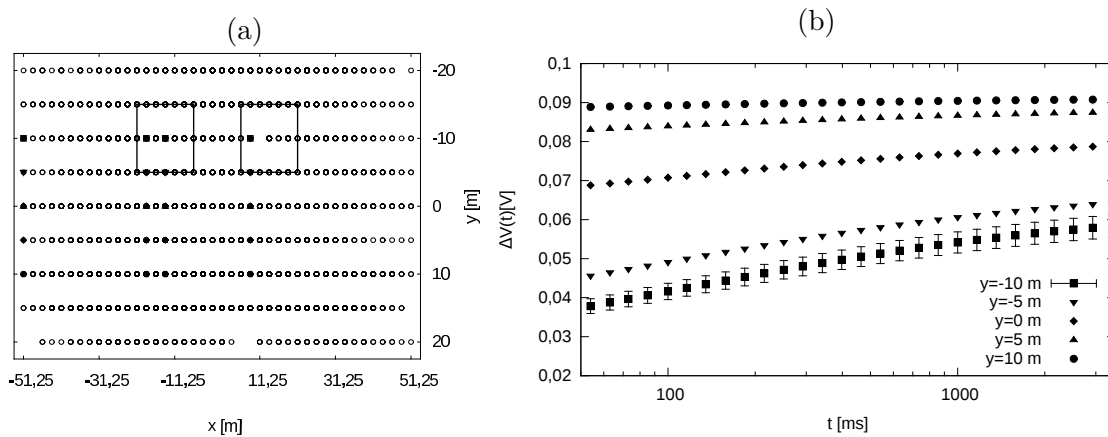


Abbildung 3.8.: (a) Gekennzeichnet sind alle genutzten Elektrodenpositionen, wobei die Positionen der den linken Block überdeckenden Sender-Empfänger-Kombinationen der in (b) verwendeten Transienten hervorgehoben sind. (b) Dargestellt ist die Potentialdifferenz ΔV gegen die Zeit t für ausgewählte Sender-Empfänger-Kombinationen. Für den Transienten der Sender-Empfänger-Kombination bei -10 m sind 5%ige Fehlerbalken eingezeichnet.

Die in Abbildung 3.8(b) beispielhaft dargestellten Transienten wurden für die in (a) hervorgehobenen Elektrodenkombinationen berechnet. Die Auslagen verlaufen im x-Bereich des linken Blocks und die Transienten steigen für alle Profile mit zunehmender Zeit t an. Der Transient, der direkt oberhalb des Blocks liegenden Auslage bei $y=-10$ m, zeigt den stärksten Einfluss des Blocks. Innerhalb der Fehlergrenzen von 5% sind die Transienten für $y=-5$ m und $y=0$ m zu unterscheiden. Diese drei Transienten zeigen eine deutliche Dynamik. Ab 10 m Abstand ist nur noch ein geringer Einfluss auf die Transienten erkennbar.

Die Transienten in Abbildung 3.9, welche für im x-Bereich des rechten Blocks

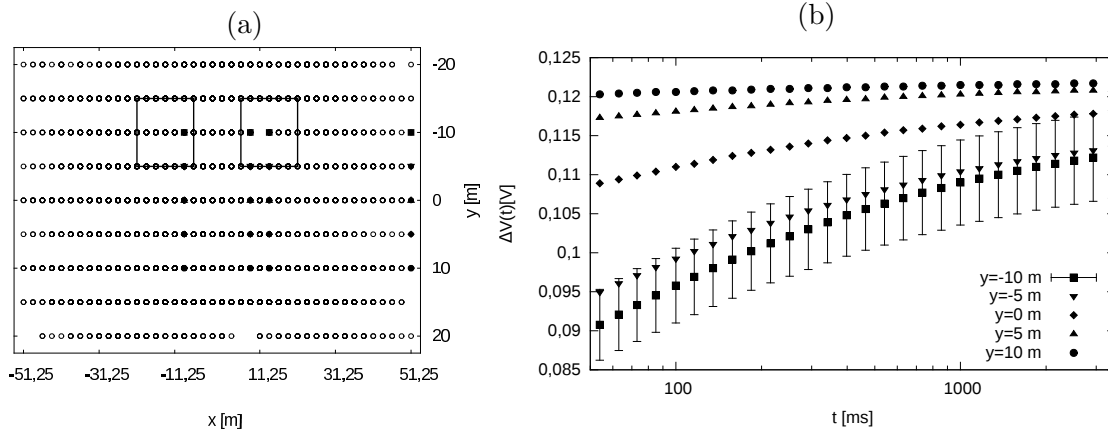


Abbildung 3.9.: (a) Gekennzeichnet sind alle genutzten Elektrodenpositionen, wobei die Positionen der den rechten Block überdeckenden Sender-Empfänger-Kombinationen der in (b) verwendeten Transienten hervorgehoben sind. (b) Dargestellt ist die Potentialdifferenz ΔV gegen die Zeit t für ausgewählte Sender-Empfänger-Kombinationen. Für den Transienten der Sender-Empfänger-Kombination bei -10 m sind 5%ige Fehlerbalken eingezeichnet.

liegende Auslagen berechnet wurden, zeigen grundsätzlich ein zu Abbildung 3.8 ähnliches Verhalten. Der Einfluss des Blocks ist jedoch schwächer, was an dem deutlich erhöhten Widerstand mit 100Ω m liegt. Die Aufladbarkeiten sind für beide Blöcke identisch. Für einen Abstand von 5 m zur Blockkante zeigen sich nur für die ersten Zeitpunkte Abweichungen im Transientenverlauf zu $y=10$ m, welche auch unter Berücksichtigung der Fehler eindeutig unterscheidbar sind.

Zusammenfassung der synthetischen Studien des dreidimensionalen Untergrundes

Grundsätzlich kann ab einer Entfernung in y -Richtung, welche größer ist als die Ausdehnung der Blöcke in y -Richtung, der Einfluss der Blöcke auf die Form der Transienten unter Berücksichtigung eines 5%igen Fehlerlevels vernachlässigt werden. Der benötigte Abstand verkleinert sich mit steigender Auslagengröße und steigendem Gleichstromwiderstand des Störkörpers. Der Einfluss eines gutleitenden Störkörpers muss für Transienten von Auslagen in einer größeren Entfernung beachtet werden als bei einer schlechtleitenden Struktur gleicher Ausdehnung und Lage. Dies liegt unter anderem an der Maskierung des rechten schlechtleitenden Blocks durch die im Verhältnis besser leitenden umgebenen Strukturen (siehe auch Kapitel 2.2.3). Bei einer Inversion in zwei Dimensionen muss ebenfalls beachtet werden, dass Auslagen mit einer kleinen Gesamtlänge stärker von entfernten, dreidimensionalen Strukturen beeinflusst werden als Auslagen großer Ausdehnung.

Die Form der Transienten war in den durchgeführten Studien stark abhängig von

der Zahl der abgedeckten Störkörper durch die Auslage. Bei nur einem abgedeckten Block zeigten die Transienten stets einen steigenden Verlauf mit der Zeit, unabhängig von Auslagengröße und Verhältnis der Gleichstromwiderstände von Störkörper und Hintergrund. Wurden zwei oder mehr Störkörper von der Auslage abgedeckt, so fiel der Transient mit zunehmender Zeit ab. Eine solche Form des Transienten wird auch als negativer IP Effekt bezeichnet und wurde unter anderem von Dahlin and Leroux (2012) in Verbindung mit stark inhomogenen Verteilungen der Polarisierung im Untergrund beobachtet.

Das oben beschriebene Verhalten wurde für alle durchgeführte Studien festgestellt, sollte allerdings für andere Messkonfigurationen gegebenenfalls erneut überprüft werden, um die gewonnenen Erkenntnisse zu verifizieren.

3.2.3. Diskussion der Modellstudien mit *For3DIP*

Ein konsistentes Verhalten des Algorithmus *For3DIP* über einen Wertebereich von 1 - 1000 Ωm ließ sich durch synthetische Studien beispielsweise für homogene Halbräume (siehe Kapitel 3.2.1) zeigen. Die Abweichung zur analytischen Lösung lässt sich für das verwendete grobe Gitter durch ein 5%iges Fehlerlevel abdecken. Durch eine Verfeinerung des Gitters lässt sich die Abweichung kontinuierlich verkleinern, was allerdings mit einer deutlichen Erhöhung der Laufzeit der Inversion einhergeht. Die korrekte Funktion der implementierten Vorwärtsrechnung kann somit auch für die spätere Verwendung im Inversionsprogramm *IP3DInv_{DC}* angenommen werden. Zur Berücksichtigung der Abweichung zur analytischen Lösung wird ein Fehler von 5% genutzt, welcher für alle Zeitpunkte auf den gegebenenfalls vorhandenen Messfehler addiert wird (siehe Kapitel 5.4).

Studien mit dreidimensionaler Untergrundstruktur zeigen, dass ab einer Entfernung in y-Richtung, welche größer ist als die Ausdehnung der Blöcke in y-Richtung, der Einfluss der Blöcke auf die Form der Transienten unter Berücksichtigung eines 5%igen Fehlerlevels vernachlässigt werden kann (siehe Kapitel 3.2.2). Der benötigte Abstand vergrößert sich mit abnehmender Auslagengröße und sinkendem Gleichstromwiderstand des Störkörpers. Negative IP-Effekte sind deutliche Hinweise auf stark variierende Verteilungen der polarisierbaren Bereiche im Untergrund und sollten nicht mit Kopplungseffekten verwechselt werden [Dahlin and Leroux (2012)]. Kleinräumige Auslagen zeigten stärkere Einflüsse von dreidimensionalen Untergrundstrukturen, was bei einem Vergleich von zweidimensionalen mit dreidimensionalen Inversionsergebnissen beachtet werden sollte.

4. Inversion der Induzierten

Polarisation im Zeitbereich in drei Dimensionen

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde das von Hönig (2002) entwickelte Programm *IPInv* zur Inversion von Zeitbereichs-IP-Daten in zwei Dimensionen weiterentwickelt. Die Nomenklatur und der Aufbau dieses Kapitels folgen Hönig (2002). Die Vorwärtsrechnung des entwickelten Inversionsprogramms *IP3DInv_{DC}* beruhte bereits auf dem 3D-Finite-Differenzen-Algorithmus von Spitzer (1995) zur Gleichstromwiderstands-Modellierung. Die Erweiterung der 2D IP-Inversion auf drei Dimensionen erforderte zuvor neben der Übersetzung der Routinen von *Fortran 77* in *Fortran 95*, eine Anpassung der Programmstruktur zur Reduzierung des benötigten Speichers und eine Parallelisierung des Algorithmus. Die Berechnungen innerhalb der Routinen wurden von zwei auf drei Dimensionen erweitert und flexible Elektrodenpositionen implementiert. Zur Validierung wurden synthetische Studien durchgeführt von denen zwei beispielhaft in Kapitel 4.4 vorgestellt werden. Eine Zusammenfassung der Erkenntnisse aus den synthetischen Studien und eine Diskussion im Hinblick auf die Inversion von Felddaten in Kapitel 5 findet sich in Kapitel 4.4.3.

Das Prinzip der Inversion, welche aus drei Schritten besteht, wird in Kapitel 4.1 vorgestellt. Die dem Algorithmus *IP3DInv_{DC}*, welcher für die ersten beiden Schritte verwendet wird, zugrunde liegende Theorie wird in Kapitel 4.2 und in Anhang E vorgestellt. Für die in der implementierten Vorwärtsrechnung nach Spitzer (1995) verwendeten Grundlagen wird auf Kapitel 3.1 verwiesen. Die verwendeten mathematischen Grundlagen des Algorithmus *IP3DInv_{IP}* finden sich in Kapitel 4.3 und ein Manual in Anhang F. Eine ausführliche Vorstellung der Entwicklung des Programms in zwei Dimensionen und eine Diskussion dessen findet sich in Hönig (2002).

4.1. Prinzip der Inversion

Unter Verwendung der Näherung (3.17) wird die Inversion von Zeitbereichs-IP-Daten auf eine Vielzahl dreidimensionaler DC-Inversionen und Homogener Halbraum-IP-Inversionen reduziert. Die in dieser Arbeit weiterentwickelte Methode der IP-Inversion für Zeitbereichs-Daten in drei Dimensionen wird so zu einem dreistufigen Prozess:

1. DC-Inversion des letzten Zeitpunkts der gemessenen Transienten aller Sender-Empfänger-Kombinationen in ein zeitabhängiges Widerstandsmodell für den letzten Zeitpunkt, welcher für den Einschaltvorgang nah am Gleichstromwiderstand liegt.
2. DC-Inversion der einzelnen Zeitpunkte der gemessenen Transienten aller Sender-Empfänger-Kombinationen in zeitabhängige Widerstandsmodelle des jeweiligen Zeitpunkts.
3. Zusammenfassung der zeitabhängigen Widerstände der einzelnen Zellen in einen Transienten des zeitabhängigen Widerstands der jeweiligen Zelle. Anpassung des Transienten der Zelle durch ein homogenes Modell des Untergrunds durch eine Homogene-Halbraum-IP-Inversion.

DC-Inversion des letzten Zeitpunkts

Im ersten Schritt werden die zeitabhängigen Widerstände des letzten Zeitpunkts aller Sender-Empfänger-Kombinationen mittels einer DC-Inversion in drei Dimensionen invertiert. Es wird ein Modell der Widerstandsverteilung des Untergrunds gefunden, welches die gemessenen Potentialdifferenzen aller Sender-Empfänger-Kombinationen für den letzten Zeitpunkt erklärt. Aufgrund seiner Nähe zum DC-Level können bei der Wahl des Startmodells Informationen über den Gleichstromwiderstand, gewonnen mit anderen Messmethoden, einfließen. Die Inversion wird mit dem Programm *IP3DInv_{DC}* durchgeführt und es werden in Abhängigkeit vom Startmodell bis zu 25 Iterationsschritte benötigt. Mit einem L-Curve Verfahren, welches in Kapitel 4.2.2 genauer vorgestellt wird, werden die optimalen Startwerte der Regularisierungsparameter bestimmt. Der Umfang dieses Schritts umfasst in etwa den einer regulären DC-Inversion.

DC-Inversion der einzelnen Zeitpunkte

Der zweite Schritt besteht aus je einer dreidimensionalen DC-Inversion pro Zeitpunkt. Als Startmodell für den vorletzten Zeitpunkt wird in diesem Schritt das

Widerstandsmodell des letzten Zeitpunkts, welches im ersten Schritt ermittelt wurde, genutzt. Dieses sehr gute Startmodell muss nur in polarisierbaren Bereichen des Untergrunds verändert werden, so dass meist in nur 3-5 Iterationsschritten eine gute Anpassung erreicht werden kann. Für den vorvorletzten Zeitpunkt wird nun als Startmodell das Widerstandsmodell des vorletzten Zeitpunkts genutzt. Für alle weiteren Zeitpunkte wird analog das Widerstandsmodell des vorherigen Zeitpunkts als Startmodell genutzt.

Die Möglichkeit der Verwendung eines Startmodells basierend auf dem Ergebnis des jeweils vorherigen Zeitpunkts, anstelle des Modells des letzten Zeitpunkts für alle anderen Zeitpunkte, wurden im Rahmen dieser Arbeit implementiert. Diese Methode verhindert große Sprünge zwischen den Widerstandsmodellen der einzelnen Zeitpunkte und sorgt für möglichst kontinuierliche Änderungen vom Modell des letzten hin zum Modell des ersten Zeitpunkts. Die Regularisierungsparameter können gegenüber denen des ersten Schritts erhöht werden, um die Variationen in unpolarisierbaren Bereichen möglichst klein zu halten, aber auch wie im ersten Schritt gewählt werden.

IP-Inversion der einzelnen Zellen

Die zeitabhängigen Widerstandsmodelle des zweiten Schritts werden für jede Zelle des Modellraums zu einem Transienten des zeitabhängigen Widerstands der Zelle zusammengesetzt. Diese Transienten $\rho(t)$ der Zellen werden im Folgenden als „zusammengesetzte Zelltransienten“ bezeichnet. Dies soll die eindeutige Unterscheidung von den im Feld gemessenen Transienten der zeitabhängigen Potentialdifferenzen $\Delta V(t)$ der verschiedenen Sender-Empfänger-Kombinationen erleichtern. Mit dem Programm *IP3DInv_{IP}* wird für jede Zelle unabhängig von allen anderen Zellen eine Homogene-Halbraum-IP-Inversion durchgeführt und der zusammengesetzte Zelltransient durch einen berechneten Transienten für einen homogenen Untergrund („berechneter Zelltransient“) angepasst.

Bei möglichst kontinuierlichen Änderungen der zeitabhängigen Modelle untereinander, welche idealerweise nur in polarisierbaren Bereichen des Modellraums auftreten, und einer guten Wahl des IP-Startmodells können glaubhafte dreidimensionale IP-Modelle des Untergrunds erzielt werden.

4.2. Grundlagen des verwendeten DC-Inversionsalgorithmus

Im Rahmen einer Inversion wird ein Satz Messdaten \mathbf{D} durch ein mögliches Modell \mathbf{m} des Untergrunds erklärt. Für ein angenommenes Untergrundmodell werden für gegebene Elektrodenkombinationen die Potentialdifferenzen berechnet und im Modelldatenvektor \mathbf{F} gespeichert. Die Anzahl der verwendeten Sender-Empfänger-Kombinationen N_d definiert die Dimension des Mess- und Modelldatenvektors. Ein Startmodell des Widerstands des Untergrunds, welches a priori Informationen enthalten kann, wird iterativ verbessert bis die Differenz zwischen gemessenen und berechneten Daten unterhalb eines festgelegten Grenzwertes liegt. Bei einem dreidimensionalen Untergrundmodell handelt es sich um ein stark unterbestimmtes Problem. Die Anzahl der Gleichungen ist geringer als die der freien Parameter (Anzahl der Gitterzellen), weshalb es keine eindeutige Lösung für das Problem der bestmöglichen Anpassung gibt (Blaschek, 2006). Neben der Anpassung der Daten wird deshalb eine weitere Einschränkung des Modellraums benötigt, so dass sich das Optimierungsproblem in der Form

$$\Phi(\mathbf{m}) = \Phi_d(\mathbf{m}) + \lambda \Phi_m(\mathbf{m}) \quad (4.1)$$

darstellen lässt. Das Ziel ist die Minimierung der Kostenfunktion $\Phi(\mathbf{m})$, welche von der Anpassung der Messdaten $\Phi_d(\mathbf{m})$, dem zusätzlich geforderten Kriterium $\Phi_m(\mathbf{m})$ und dem Regularisierungsparameter λ abhängt. Der Regularisierungsparameter λ stellt die Wichtung zwischen den beiden Termen dar und ein mögliches Kriterium $\Phi_m(\mathbf{m})$ ist die Glattheit des Modells. Die Inversion wird mit logarithmierten Werten durchgeführt um dem großen Wertebereich der Leitfähigkeit bzw. des Widerstandes gerecht zu werden.

Die Berechnung der Differenz zwischen gemessenen und berechneten Daten kann auf verschiedene Arten erfolgen. Der Root-Mean-Square-Error (RMS) der L -ten Iteration wird mittels des Messdatenvektors \mathbf{D} , des Modelldatenvektors \mathbf{F} und der Anzahl der verwendeten Sender-Empfänger-Kombinationen N_d über

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{N_d} \sum_{p=1}^{N_d} \left(\frac{F(m_L)_p - D_p}{D_p} \right)^2} \quad (4.2)$$

berechnet.

Der Fehler χ^2 wird mit dem Messdatenfehler ϵ gewichtet:

$$\chi^2 = \frac{1}{N_d} \cdot \sum_{p=1}^{N_d} \left(\frac{F(m_L)_p - D_p}{\epsilon_p} \right)^2. \quad (4.3)$$

Es kann zwischen einer *RMS* oder χ^2 kontrollierten Inversion gewählt werden. Eine *RMS* gesteuerte Inversion zielt auf eine möglichst genaue Anpassung der Messwerte ab. Bei verrauschten Daten kann es zu einer Anpassung des Rauschens und somit zu einem verfälschten Ergebnis kommen. Wird eine χ^2 kontrollierte Inversion gewählt, werden die Messdaten im Rahmen der Messfehler angepasst. Mögliche Ausreißer und Rauschen haben so einen geringeren Einfluss auf das Ergebnis der Inversion. Die Schwierigkeit hierbei ist das Abschätzen der Messfehler, welche sich meist aus einer durch Wiederholungsmessungen definierten Standardabweichung und einem relativen Fehlerlevel zusammensetzen. Wird dieses prozentuale Fehlerlevel zu klein abgeschätzt, werden auch bei einer χ^2 gesteuerten Inversion die Daten überangepasst und das Ergebnis verfälscht. Bei einem zu groß gewählten Fehlerlevel wird die Inversion zu einem zu frühen Zeitpunkt abgebrochen und es ist keine ausreichende Anpassung der Daten gewährleistet.

4.2.1. Form der Kostenfunktion und ihre Minimierung mittels der Newtonmethode

Die in der vorliegenden Arbeit verwendete Kostenfunktion hat für die L-te Iteration die Form

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{m})_L = & \underbrace{(\mathbf{D} - \mathbf{F}(\mathbf{m}_L))^T \mathbf{W}^T \mathbf{W} (\mathbf{D} - \mathbf{F}(\mathbf{m}_L))}_{\text{Datenanpassung}} \mathbf{k} \\ & + \lambda \underbrace{(\mathbf{m}_{L-1} - \mathbf{m}_0)^T \mathbf{G}^T \mathbf{G} (\mathbf{m}_{L-1} - \mathbf{m}_0)}_{\text{Glättung}} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Die Datenanpassung wird durch den ersten Term auf der rechten Seite beschrieben und hat bei einer kleinen Differenz zwischen berechneten und gemessenen Daten einen kleinen Wert. Der zweite Term, welcher die Glattheit des Modells beschreibt, ist klein, wenn das Modell im Vergleich zum Startmodell eine ähnliche Gestalt hat. Das zugrunde liegende Prinzip geht auf William of Occam zurück und stabilisiert die Inversion durch die Wahl möglichst einfacher, glatter Modelle. Die Beiträge Dipol-Dipol ähnlicher Auslagen, welche stets einen negativen Geometriefaktor besitzen, müssen mit negativem Vorzeichen in die Berechnung eingehen. Dafür wurde die Matrix \mathbf{k} eingeführt, welche auf der Hauptdiagonalen mit -1 für Sender-Empfänger-Kombinationen Dipol-Dipol ähnlicher Auslagen und für alle anderen Auslagen mit $+1$ belegt ist. Durch die Belegung der Matrix \mathbf{k} über den Geometriefaktor ist eine

gemeinsame Inversion beliebiger, verschiedener Auslagenarten möglich.

Die Fehler-Kovarianz-Matrix $\mathbf{W}^T \mathbf{W}$ enthält nur auf der Hauptdiagonalen von Null verschiedene Werte

$$\mathbf{W}^T \mathbf{W} = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon_i^2 + rel} & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad (4.5)$$

und ist über die prozentuale Standardabweichung ϵ der Messdaten und das prozentuale Fehlerlevel rel definiert. Das prozentuale Fehlerlevel wird für das gewählte Gitter entsprechend Kapitel 3.2.3 abgeschätzt. Die Fehler-Kovarianz-Matrix reduziert den Einfluss stark fehlerbehafteter Daten im Vergleich zu weniger fehlerbehafteten Daten.

Die $a_p \times a_p$ Glättungsmatrix \mathbf{G}_x in x-Richtung berechnet sich über die Zellgröße in horizontaler x-Richtung \mathbf{f} und die vertikale Zellausdehnung \mathbf{h}

$$\mathbf{G}_{x,m,n} = \begin{cases} -\frac{h_k}{f_i} & \text{für } m = n \\ +\frac{h_k}{f_i} & \text{für } m = n - 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.6)$$

und enthält nur auf der Hauptdiagonalen und der ersten, oberen Nebendiagonalen von Null verschiedene Einträge, welche sich nur durch das Vorzeichen unterscheiden. Der Index m wird über die Zellindizes i, j, k berechnet $m = i + (k - 1) \cdot (i_m - 1) + (j - 1) \cdot (i_m - 1) \cdot (k_m - 1)$. Durch die Anwendung auf einen Datenvektor werden die Differenzen der Leitfähigkeiten zwischen benachbarten Zellen in x-Richtung gebildet. Große Differenzen haben eine große Zahl als Ergebnis und verweisen auf ein rauhes Modell, während kleine Differenzen zu einer kleinen Zahl führen und glatte Modelle beschreiben. In y-Richtung wird die Glättungsmatrix \mathbf{G}_y ebenfalls mit der Zellgröße in horizontaler y-Richtung \mathbf{g} und die vertikale Zellausdehnung \mathbf{h} berechnet

$$\mathbf{G}_{y,m,n} = \begin{cases} -\frac{h_k}{g_j} & \text{für } m = n \\ +\frac{h_k}{g_j} & \text{für } m = n - (i_m \cdot k_m) \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.7)$$

Die Hauptdiagonale und die $(i_m \cdot k_m)$ -te Nebendiagonale sind mit von Null verschiedenen Werten besetzt, welche sich ebenfalls nur durch das Vorzeichen unterscheiden. Die Glättungsmatrix \mathbf{G}_z in z-Richtung enthält auf der Hauptdiagonalen und auf der

(i_m) -ten Nebendiagonale von Null verschiedene Werte:

$$\mathbf{G}_{z,m,n} = \begin{cases} -1 & \text{für } m = n \\ +1 & \text{für } m = n - i_m \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.8)$$

Analog zur horizontalen Glättung wird die Differenz zwischen vertikalen Leitfähigkeiten gebildet (De Groot-Hedlin and Constable, 1990). Die Glättungsmatrizen der drei Gitterrichtungen lassen sich zusammenfassen als Glättungsmatrix \mathbf{G} :

$$\mathbf{G}^T \mathbf{G} = w_x \mathbf{G}_x^T \mathbf{G}_x + w_y \mathbf{G}_y^T \mathbf{G}_y + w_z \mathbf{G}_z^T \mathbf{G}_z \quad (4.9)$$

mit der Möglichkeit der Wichtung der Glättung in den einzelnen Richtungen über w_x , w_y und w_z .

Der Regularisierungsparameter λ aus Gleichung (4.4) ermöglicht eine Gewichtung der Datenanpassung gegenüber der Glättung. Eine geringe Abweichung vom Startmodell wird durch einen großen Regularisierungsparameter belohnt. Auf diese Weise können a priori Informationen eingebunden werden und der Einfluss dieser auf die Inversion angegeben werden. Kleine Regularisierungsparameter legen grundsätzlich ein stärkeres Gewicht auf die Datenanpassung.

Leitet man Gleichung (4.4) nach den Modellparametern ab und substituiert $\left. \frac{\partial F_m}{\partial m_n} \right|_{\mathbf{m}_L}$ mit der Sensitivitätsmatrix \mathbf{S}_L erhält man

$$\nabla \Phi(\mathbf{m})_L = -2\mathbf{S}_{L-1}^T \mathbf{W}^T \mathbf{W} (\mathbf{D} - \mathbf{F}(\mathbf{m}_{L-1})) \mathbf{k} + \lambda \mathbf{G}^T \mathbf{G} (\mathbf{m}_{L-1} - \mathbf{m}_0). \quad (4.10)$$

Die Sensitivitätsmatrix \mathbf{S} , welche den Einfluss einer Leitfähigkeitsänderung am Ort \mathbf{r}' auf einen Empfänger am Ort \mathbf{r} beschreibt, kann auf zwei verschiedene Arten näherungsweise berechnet werden (Hördt, 1998; Hönig, 2002):

1. Perturbationsmethode: Führt die numerische Differenziation der Modelldaten nach den Modellparametern durch.
2. Reziprozitätsmethode: Nutzt die Vertauschbarkeit von Sender- und Empfängerpositionen

Bei der Perturbationsmethode muss je Zelle eine Vorwärtsrechnung je Achsrichtung durchgeführt werden. Die Leitfähigkeit der Zelle wird variiert und in jeder Achsrichtung am Ort \mathbf{r}' wird ein Einheitsdipol plaziert und für diesen das elektrische Feld am Ort \mathbf{r} berechnet. Diese Art der Berechnung bietet sich beispielsweise für Inversionen

in bis zu einer Dimension an. Für die Inversion in drei Dimensionen des in Kapitel 3 verwendeten Gitters mit 22.344 Zellen müssten 67.032 Vorwärtsrechnungen durchgeführt werden, was zu nicht realisierbaren Rechenzeiten führen würde.

Als eine Alternative, welche schon in zwei Dimensionen zu einer deutlichen Rechenzeiterparnis führt, ist die Reziprozitätsmethode implementiert. Das zugrunde liegende Prinzip ist die Vertauschbarkeit von Sender- und Empfängerpositionen (siehe auch Kapitel 3.1.5). Das oben beschriebene elektrische Feld \mathbf{E} hat den gleichen Betrag, wenn man die Einheitsdipole am Ort \mathbf{r} senden lässt und die drei Komponenten am Ort \mathbf{r}' bestimmt. Es muss für alle Empfänger- und Senderpositionen je eine Vorwärtsrechnung durchgeführt werden, was für 269 Senderpositionen mit je sieben Empfängern zu 2152 Vorwärtsrechnungen führt. Die Sensitivitäten der Sender-Empfänger-Kombination p wird über das Zellvolumen \mathbf{v} , die Potentialdifferenz ΔV_p und die Leitfähigkeit σ normiert

$$S_{i,j,k,p} = \frac{\sigma_{i,j,k} v_{i,j,k}}{\Delta V_p} \cdot ((\nu_{x,i,j,k,ps} \cdot \nu_{x,i,j,k,pe}) + (\nu_{y,i,j,k,ps} \cdot \nu_{y,i,j,k,pe}) + (\nu_{z,i,j,k,ps} \cdot \nu_{z,i,j,k,pe})). \quad (4.11)$$

und ist über die Potentialgradienten des Senders ν_{ps} und die des Empfängers mit ν_{pe} definiert.

Das Potential \mathbf{V} jeder Sender- und Empfängerposition wird nach Kapitel 3.1.4 berechnet. Der Gradient des Potentials ν_x wird in x-Richtung über das Potential \mathbf{V} der benachbarten Zellen und die Zellgrößen in x-Richtung \mathbf{f} berechnet:

$$\nu_{x,i,j,k,p} = \frac{0,25}{f_i} (\mathbf{V}_{i+1,j+1,k+1,p} + \mathbf{V}_{i+1,j+1,k,p} + \mathbf{V}_{i+1,j,k+1,p} + \mathbf{V}_{i+1,j,k,p} - \mathbf{V}_{i,j+1,k+1,p} - \mathbf{V}_{i,j+1,k,p} - \mathbf{V}_{i,j,k+1,p} - \mathbf{V}_{i,j,k,p}) \quad (4.12)$$

Die Gradienten in y- und z-Richtung werden analog berechnet.

Durch das Aufaddieren der Sensitivitäten der einzelnen Sender-Empfänger-Kombinationen wird die Coverage-Matrix \mathbf{C} berechnet

$$C_{i,j,k} = \sum_{p=1}^{N_d} \frac{S_{i,j,k,p}}{v_{i,j,k} \cdot S_{max}}. \quad (4.13)$$

Diese ist ein Maß für den Einfluss einzelner Zellen auf die Anpassung der Messdaten. Für eine bessere Vergleichbarkeit der Zellen und verschiedenen Inversionen untereinander, werden die Sensitivitäten mit dem Zellvolumen normiert, bevor sie aufaddiert werden. Es ist zudem möglich die auf ihren Maximalwert normierte Coverage zu berechnen.

Linearisiert man eine stetig differenzierbare Funktion in einem beliebigen Punkt, kann man über die Nullstelle der Tangente dieses Punkts eine verbesserte Näherung

der Nullstelle der Funktion erhalten. An diesem verbesserten Punkt wird erneut eine Tangente angelegt und das Verfahren wiederholt. Dieses Verfahren zur Nullstellenbestimmung einer Funktion benötigt keine Eingriffe in die implementierte Vorwärtsrechnung. Weitere Vorteile sind die hohe Stabilität und die relativ einfache Umsetzung des als Newtonmethode bekannten Verfahrens (Hönig, 2002).

Über die Ableitung nach dem Modellvektor ergibt sich Gleichung (4.10) zu

$$\begin{aligned} \partial_m \partial_n \Phi(\mathbf{m})_L &= 2\mathbf{S}_{L-1}^T \mathbf{W}^T \mathbf{W} \mathbf{S}_{L-1} \mathbf{k} + \lambda \mathbf{G}^T \mathbf{G} \\ &- 2 \sum_{m=1}^{a_p} (\mathbf{D} - \mathbf{F}(\mathbf{m}_{L-1}))^T \mathbf{W}^T \mathbf{W} \partial_m \partial_n \mathbf{F}(\mathbf{m}_{L-1}). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Nach Mackie et al. (1997) wird die im letzten Term enthaltene Hessematrix in der Gauß-Newton-Methode standardmäßig ignoriert. Der Hauptgrund ist neben der aufwendigen Berechnung die Tatsache, dass Gleichung (4.14) auch unter Vernachlässigung der Hessematrix nahe des Minimums gut erfüllt ist. Das für jeden Iterationsschritt zu lösende Gleichungssystem ergibt sich somit zu

$$-\frac{1}{2} \nabla \Phi(\mathbf{m})_L = \left(\mathbf{S}_{L-1}^T \mathbf{W}^T \mathbf{W} \mathbf{S}_{L-1} \mathbf{k} + \lambda \mathbf{G}^T \mathbf{G} + \beta \mathbf{I} \right) (\mathbf{m}_L - \mathbf{m}_{L-1}). \quad (4.15)$$

Zur Stabilisierung des Gleichungssystems wird der Faktor β , welcher ein Modell nahe des Startmodells belohnt, auf die Hauptdiagonale addiert. Die Bestimmung des optimalen Parameters β erfolgt durch das L-Curve-Verfahren.

4.2.2. Berechnung des Modell-Updates und Regularisierung der Kostenfunktion

Zur Lösung des symmetrischen, positiv definierten Gleichungssystems (4.15) wird die Cholesky-Zerlegung nach Press et al. (1992) genutzt. Dabei wird die Matrix in eine untere \mathbf{L} und eine obere Dreiecksmatrix \mathbf{L}^T zerlegt, wobei die Transponierte der unteren Dreiecksmatrix als obere Dreiecksmatrix definiert werden kann. Das Gleichungssystem wird dann durch Rücksubstitution gelöst. Diese Methode zur Lösung von Gleichungssystemen benötigt nur sehr wenig Speicherplatz, was bei einer Berechnung in drei Dimensionen ein wichtiger Aspekt ist, und ist um einen Faktor zwei schneller als andere Methoden (siehe auch Anhang E.3.12 und Anhang E.3.13).

Das Modell wird entsprechend des Modell-Updates modifiziert. Die Widerstände jeder Zelle des Modells werden für die nächste Iteration entsprechend des berechneten Modell-Updates erhöht oder reduziert. Die maximale Änderung ist dabei auf eine Dekade beschränkt, so dass zu große Modell-Sprünge vermieden werden.

Ein Übersteuern vor allem nahe des Minimums wird durch eine Anpassung der

Schrittweite erreicht. Der Fehler der aktuellen Iteration L wird mit dem Fehler der vorherigen Iteration $L - 1$ verglichen. Hat sich die Anpassung verschlechtert, wird das Modell \mathbf{m}_L um eine halbe Schrittweite $\delta\mathbf{m}$ in umgekehrte Richtung korrigiert und die Iteration erneut durchgeführt.

Der zweite Term auf der rechten Seite in Gleichung (4.10) beschreibt die verwendete Regularisierung. In Gleichung (4.10) ist die L_1 -Norm nach Occam dargestellt, welche grundsätzlich die Summe der Differenzen zwischen Modell- und Messdaten minimiert. Bereits kleine Differenzen haben hier einen großen Einfluss, da der Beitrag der Parametergradienten linear in die Zielfunktion eingeht.

$$\lambda \mathbf{G}^T \mathbf{G} (\mathbf{m}_{L-1} - \mathbf{m}_0) \quad L_1\text{-Norm} \quad (4.16)$$

$$\lambda \mathbf{G}^T \mathbf{G} (\mathbf{m}_{L-1} - \mathbf{m}_0)^2 \quad L_2\text{-Norm} \quad (4.17)$$

$$\lambda \mathbf{G}^T \mathbf{G} \left(\frac{(\mathbf{m}_{L-1} - \mathbf{m}_0)^2}{(\mathbf{m}_{L-1} - \mathbf{m}_0)^2 + \gamma^2} \right) \quad msg\text{-Norm} \quad (4.18)$$

Zusätzlich wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit die L_2 -Norm und der Minimum-Gradient-Support *msg* mit dem zusätzlichen Regularisierungsparameter γ nach Blaschek (2006) implementiert.

Bei Verwendung der L_2 -Norm in Gleichung (4.17) gehen kleine Gradienten deutlich weniger als große Gradienten in die Zielfunktion ein, was zu einer größeren Stabilität führt. Dies bewirkt ein möglichst glattes Modell, da vor allem große Gradienten durch das quadratische Eingehen in die Kostenfunktion die Minimierung verhindern würden.

Die Wirkung der *msg*-Regularisierung in Gleichung (4.18) lässt sich am besten durch die Betrachtung der Grenzfälle für γ beschreiben. Geht γ gegen Null, gehen bereits sehr kleine Gradienten ebenso stark wie sehr große Gradienten ein. Es werden Modelle belohnt, welche aus möglichst wenigen, sehr homogenen Gebieten bestehen. Die Stärke des Kontrast der einzelnen Gebiete ist dabei kaum relevant. Geht γ gegen unendlich, geht die *msg*-Regularisierung in die L_2 -Norm über. Über die Wahl der Art der Regularisierung und der Regularisierungsparameter lässt sich entsprechend des erwarteten Untergrunds stark die Fokussierung beeinflussen. Beispiele hierzu finden sich in Kapitel 4.4.1.

4.3. Grundlagen des verwendeten IP-Inversionsalgorithmus

Bei der Inversion des zeitabhängigen Widerstands der einzelnen Zellen wird zwischen drei möglichen Formen der zusammengesetzten Zelltransienten unterschieden:

1. zusammengesetzte Zelltransienten ohne IP-Effekt: der zeitabhängige Widerstand des letzten Zeitpunkts variiert nur um maximal 1% gegenüber dem des ersten Zeitpunkts
2. zusammengesetzte Zelltransienten mit IP-Effekt: der zeitabhängige Widerstand des letzten Zeitpunkts ist um mehr als 1% erhöht gegenüber dem des ersten Zeitpunkts
3. zusammengesetzte Zelltransienten mit untypischem Verhalten: der zeitabhängige Widerstand des letzten Zeitpunkts ist um mehr als 1% erniedrigt gegenüber dem des ersten Zeitpunkts

Für den ersten und dritten Fall werden Aufladbarkeit m , Relaxationszeit τ und der Frequenzexponent c gleich Null gesetzt. Der Gleichstromwiderstand ρ_0 wird gleich dem zeitabhängigen Widerstand $\rho(t)$ des letzten Zeitpunkts gesetzt. Für Zellen der zweiten Kategorie wird eine Homogene-Halbraum-IP-Inversion des zusammengesetzten Zelltransienten entsprechend des gewählten Modells durchgeführt. Für alle berechneten Zelltransienten wird der *RMS* berechnet und so eine Bewertung der Anpassung des zusammengesetzten Zelltransienten ermöglicht.

4.3.1. Form der Kostenfunktion und ihre Minimierung

Da es sich um ein nicht-lineares Problem handelt, wurde zur Lösung eine iterative Methode nach Marquardt (1963) gewählt, um den zusammengesetzten Zelltransienten \mathbf{D} durch ein mögliches IP-Modell eines homogenen Untergrunds \mathbf{m} zu erklären. Der berechnete Zelltransient des Modells \mathbf{m} wird im Modelldatenvektor \mathbf{F} gespeichert (Hönig, 2002). Dabei wird die Berechnung des Modell-Updates der jeweiligen Iteration mit einem Regularisierungsparameter β stabilisiert. Um der starken Dynamik der IP-Modellparameter gerecht zu werden, werden die im Folgenden beschriebenen Berechnungen mit logarithmierten Werten durchgeführt. Die Kostenfunktion Φ_L ist über

$$\Phi_L(\mathbf{m}) = \underbrace{(\mathbf{D} - \mathbf{F}(\mathbf{m}_L))^T (\mathbf{D} - \mathbf{F}(\mathbf{m}_L))}_{\text{Datenanpassung}} + \underbrace{\beta_L (\mathbf{m}_{L-1} - \mathbf{m}_0)^T (\mathbf{m}_{L-1} - \mathbf{m}_0)}_{\text{Glättung}} \quad (4.19)$$

definiert. Analog zu Gleichung (4.4) beschreibt der erste Term der rechten Seite die Datenanpassung und der zweite Term die Glättung. Allerdings gehen in Gleichung (4.19) die Fehler der zusammengesetzten Zelltransienten nicht ein. Der Regularisierungsparameter β bestraft große Modelländerungen gegenüber dem Startmodell und dämpft die Inversion, um ein Oszillieren zu verhindern. Während eine starke Regularisierung meist die Konvergenz verschlechtert, kann eine geringe Dämpfung zu einem Übersteuern des Algorithmus führen und somit eine Konvergenz verhindern. Aus diesen Gründen wird die Inversion mit einem großen Wert für β_0 begonnen, welcher bis zu einem definierten Grenzwert iterativ verkleinert wird, so dass auch schlechter aufgelöste Parameter angepasst werden können.

Durch die Nullstellenbestimmung der Ableitung der Kostenfunktion $\Phi(\mathbf{m})$ nach der Modelländerung $\delta\mathbf{m}_L = (\mathbf{m}_L - \mathbf{m}_{L-1})$ wird das Minimum der Kostenfunktion $\Phi(\mathbf{m})$ in Gleichung (4.19) bestimmt:

$$(\mathbf{S}_{L-1}^T \mathbf{S}_{L-1} + \beta_L \cdot \mathbf{I}) \delta\mathbf{m}_L = \mathbf{S}_{L-1}^T (\mathbf{D} - \mathbf{F}(\mathbf{m}_{L-1})). \quad (4.20)$$

Dabei ist \mathbf{I} die Einheitsmatrix. Für jeden Iterationsschritt kann das Modell-Update mit

$$\delta\mathbf{m}_L = (\mathbf{S}_{L-1}^T \mathbf{S}_{L-1} + \beta_L \cdot \mathbf{I})^{-1} \mathbf{S}_{L-1}^T (\mathbf{D} - \mathbf{F}(\mathbf{m}_{L-1})) \quad (4.21)$$

berechnet werden. Die Berechnung der Inversen in Gleichung (4.21) erfolgt mittels der LU-Zerlegung, welche in Anhang F.3.7 und in Anhang F.3.8 genauer erläutert wird. Das Modell wird solange iterativ verbessert, bis der Fehler einen festgelegten Grenzwert unterschreitet. Die Berechnung des Fehlers erfolgt nach

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{a_t} \sum_{t=1}^{a_t} \left(\frac{F(m_L)_t - D_t}{D_t} \right)^2}. \quad (4.22)$$

Die Sensitivitätsmatrix \mathbf{S} ist als $\left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial m_p} \right|_{\mathbf{m}_L}$ definiert und wird über die Perturbationsmethode berechnet:

$$S_{t,cc} = \frac{\rho(t)_{cc \text{ perturbiert}} - \rho(t)}{\rho(t) * 0,05} \quad (4.23)$$

Für jeden Zeitpunkt t und jeden IP-Parameter cc wird die Differenz zwischen dem zeitabhängigen Widerstand des aktuellen Modells und dem für den perturbierten Parameter cc berechneten zeitabhängigen Widerstand berechnet. Dieser wird mit dem zeitabhängigen Widerstand des aktuellen Modells normiert.

4.3.2. Startwerte für Gleichstromwiderstand und Aufladbarkeit

Aufgrund der großen Anzahl von Äquivalenzmodellen ist dieser Schritt der Inversion stark von der Wahl der Startwerte der IP-Modellparameter abhängig (siehe auch Kapitel 2.1.2). Bei schlechter Wahl kann es zu einer guten Anpassung der zusammengesetzten Zelltransienten auch von geringen IP-Effekten durch sehr extreme IP-Modellparameter kommen. Teilweise konvergiert die Inversion bei sehr schlechter Wahl auch gar nicht. Aufgrund der großen Anzahl von Zellen muss entweder dasselbe Startmodell für alle Zellen verwendet oder dieses automatisch innerhalb der Inversion ermittelt werden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde die Möglichkeit einer automatisierten Wahl des Startmodells für jede Zelle entwickelt und implementiert.

Die Definition der Aufladbarkeit m aus Gleichung (2.7) über den maximalen Wert der Spannung U_p bei fließendem Strom und dem Wert U_s direkt nach Abschalten des Sendestroms kann äquivalent durch die entsprechenden zeitabhängigen Widerstände ρ_{dc} bzw. ρ_{ac} ausgedrückt werden:

$$m = \frac{\rho_{ac}}{\rho_{dc}}. \quad (4.24)$$

Der Widerstand ρ_{ac} ist für den Zeitpunkt unmittelbar nach Abschalten des Speisestroms I definiert, so dass die Definition für den Fall eines Einschalters lautet:

$$m = \frac{\rho_{dc} - \rho_{ac}}{\rho_{dc}}. \quad (4.25)$$

Umgeformt nach dem Widerstand ρ_{ac} ergibt sich dies zu der bekannten Form in Gleichung (2.5).

Aus im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten synthetischen Studien ergaben sich näherungsweise folgende Zusammenhänge zwischen dem Gleichstromwiderstand ρ_{dc} , dem Widerstand direkt nach Einschalten des Stroms ρ_{ac} und den zeitabhängigen Widerständen des ersten verwendeten Zeitpunkts $\rho(et)$ mit 10 ms und dem des letzten verwendeten Zeitpunkts $\rho(lt)$ mit 3414 ms:

$$\rho(et) \approx \rho_{ac} + (\rho_{dc} - \rho_{ac}) \cdot 20\% = 0,8\rho_{ac} + 0,2\rho_{dc} \quad (4.26)$$

$$\rho(lt) \approx \rho_{ac} + (\rho_{dc} - \rho_{ac}) \cdot 80\% = 0,2\rho_{ac} + 0,8\rho_{dc} \quad (4.27)$$

Der zeitabhängige Widerstand des ersten verwendeten Zeitpunkts war in Bezug auf den zeitabhängigen Widerstand ρ_{ac} für den Zeitpunkt unmittelbar nach Einschalten des Stroms bereits um etwa 20% der Gesamtdynamik des Transienten erhöht. Dies spiegelt die große Dynamik der frühen Zeiten wider und verdeutlicht, wie wichtig

eine Messung für möglichst kleine Zeiten ist. Für den letzten verwendeten Zeitpunkt war der zeitabhängige Widerstand um durchschnittlich 80% der Gesamtdynamik des Transienten erhöht. Der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} wurde im verwendeten Zeitfenster nicht erreicht. Da die Form und Dynamik der Transienten stark vom untersuchten Untergrund abhängen, wurde eine Vielzahl von unterschiedlichen Modellen untersucht und durchschnittliche Prozentzahlen berechnet. Aus den Gleichungen (2.5), (4.26) und (4.27) lassen sich Näherungen für den Gleichstromwiderstand ρ_{dc} und die Aufladbarkeit m herleiten. Setzt man Gleichung (2.5) in Gleichung (4.26) und Gleichung (4.27) ein, erhält man:

$$\rho(et) \approx (1 - 0,8m) \rho_{dc} \quad (4.28)$$

$$\rho(lt) \approx (1 - 0,2m) \rho_{dc} \quad (4.29)$$

Nach m oder ρ_{dc} aufgelöst und gleichgesetzt, ergeben sich für den Gleichstromwiderstand ρ_{dc} und die Aufladbarkeit m näherungsweise

$$m \approx \frac{\rho(lt) - \rho(et)}{0,8\rho(lt) - 0,2\rho(et)} \quad (4.30)$$

$$\rho_{dc} \approx \frac{4}{3}\rho(lt) - \frac{1}{3}\rho(et). \quad (4.31)$$

Die Näherungen werden verwendet, um für die Inversion automatisiert Startwerte für den Gleichstromwiderstand ρ_{dc} und die Aufladbarkeit m anzunehmen, welche möglichst nah an den wahren Werten liegen. In einer festgelegten Anzahl von Iterationsschritten werden zu Beginn nur die Relaxationszeit τ und der Frequenzexponent c angepasst. Wird innerhalb dieser Iterationsschritte eine ausreichend gute Anpassung erreicht, so wird die Inversion beendet. Wird der festgelegte Grenzwert des Fehlers nicht unterschritten, werden auch der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} und die Aufladbarkeit m variiert. Auf diese Weise konnte eine deutliche Verbesserung der Konvergenz und somit eine Laufzeitreduktion erreicht werden. Synthetische Studien zeigen zudem deutliche Verbesserungen in der Wiedergabe der vorwärtsgerechneten Modelle, wie beispielhaft in Kapitel 4.4 und Kapitel 5.4.4 gezeigt wird.

4.4. Modellstudien mit $IP3DInv_{DC}$ und $IP3DInv_{IP}$

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden zur Validierung des auf drei Dimensionen erweiterten Programms $IP3DInv$ synthetische Studien durchgeführt, von denen im Folgenden zwei ausgewählte Studien vorgestellt werden. In Kapitel 4.4.1 werden die Inversionsergebnisse der in Kapitel 3.2.1 untersuchten synthetischen Transienten vorgestellt. Dabei werden der Einfluss des Regularisierungsparameters λ und das Inversionsprinzip verdeutlicht. Die Inversionsergebnisse des Blockmodells aus Kapitel 3.2.2 werden für verschiedene IP-Modelle in Kapitel 4.4.2 vorgestellt. Die Möglichkeit der Wahl der Regularisierungsparameter über das L-Curve-Verfahren wird erklärt und eine Aussage über die Detektierbarkeit von gut- und schlecht leitenden Strukturen und deren IP-Parametern getroffen.

4.4.1. Homogener Halbraum

Für die Studie des homogenen Halbraums mit einem Gleichstromwiderstand von $1 \Omega m$ wurden unverrauschte Daten genutzt, welche im Folgenden als synthetische Messdaten bezeichnet werden. Abweichungen in den Inversionsergebnissen verschiedener Regularisierungsparameter lassen sich so eindeutig auf die Regularisierung zurückführen. Die Aufladbarkeit betrug $500 \frac{mV}{V}$ bei einer Relaxationszeit von 0,5s und einem Frequenzexponenten von 0,5 (siehe Abbildung 3.3).

DC-Inversion des letzten Zeitpunkts

Für Inversionen, durchgeführt mit drei verschiedenen Regularisierungsparametern, sind die Widerstandsmodelle der vierten Iteration in Abbildung 4.1 (a-i) dargestellt. Die Regularisierungsparameter β und γ wurden gleich Eins gewählt. Die erste Zeile zeigt die Ergebnisse der Inversion mit $\lambda = 10$ (a-c), die zweite Zeile für $\lambda = 100$ (d-f) und die dritte für $\lambda = 1000$ (g-i). Die erste Spalte zeigt den inneren Modellraum (a, d, g), die zweite Spalte einen vertikalen Schnitt durch den Modellraum bei $y=0 m$ (b, e, h) und die dritte einen horizontalen Tiefenschnitt bei $z=5 m$ (c, f, i). Zu beachten ist der stark begrenzte Bereich der Farbskala des zeitabhängigen Widerstands zur Verdeutlichung der Unterschiede der Modelle zueinander. Die vierte Zeile zeigt die QQ-Plots der vierten Iteration der drei Inversionen (j-l). Aufgetragen sind die für das Modell in (a-i) berechneten Potentialdifferenzen ΔV_m gegen die synthetischen Potentialdifferenzen ΔV_d als Punkte. Zwei Linien markieren einen Bereich der fünfprozentigen Abweichung der Potentialdifferenzen. Durch die doppelt logarithmische Darstellung bietet der QQ-Plot eine gute Möglichkeit der Visualisierung der Datenanpassung auch bei einer großen Anzahl von Daten und einem großen Wertebereich des zeitabhängigen Widerstands.

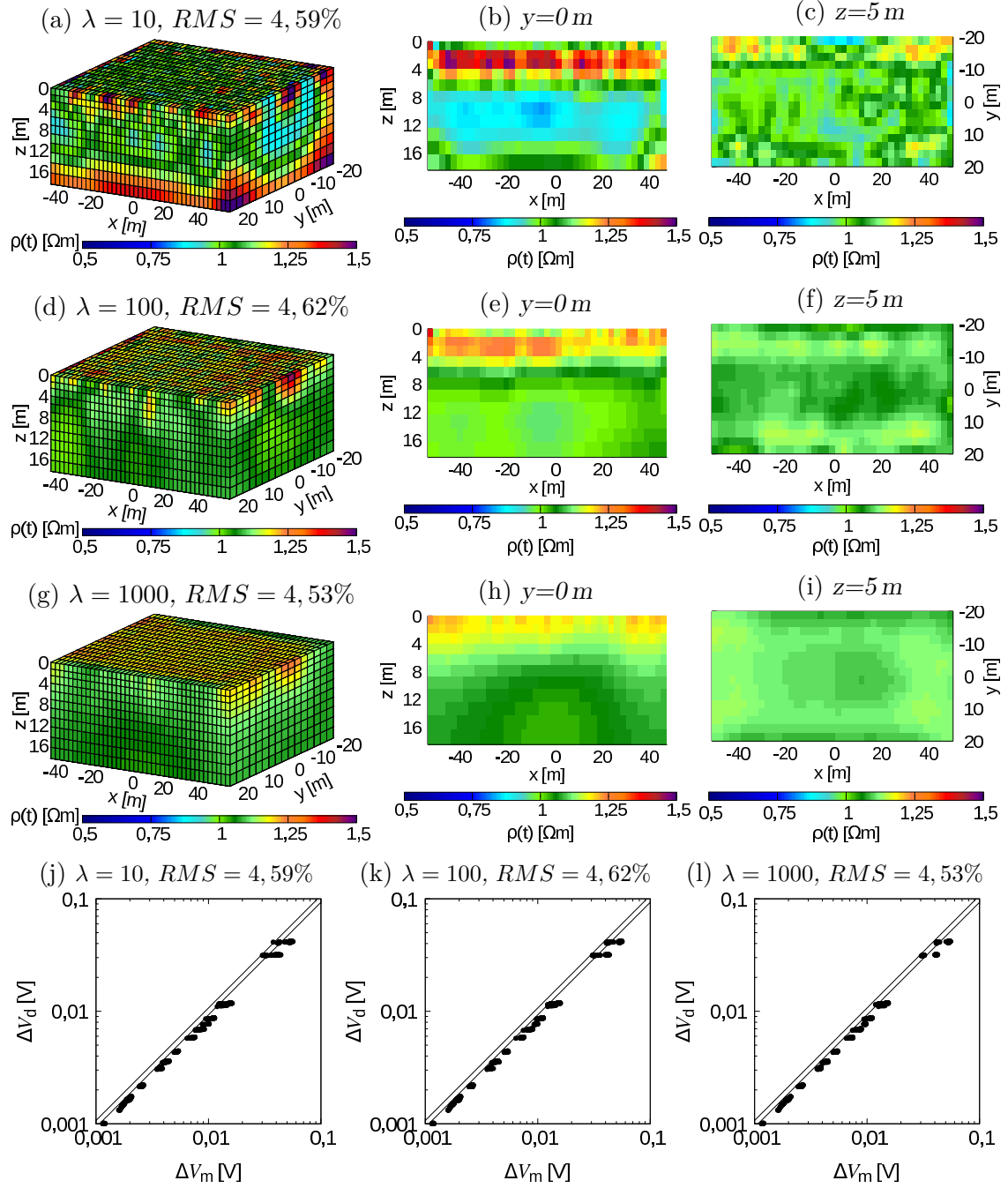


Abbildung 4.1.: (a-i) Die Verteilung des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms ist für Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ dargestellt. In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefschnitt bei $z=5$ m. (j-l) QQ-Plot der Inversion des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ .

Der RMS der drei Inversionsergebnisse liegt in einem sehr kleinen Bereich von 4,53% bis 4,62% und auch visuell sind kaum Unterschiede der Anpassung in den QQ-Plots zu erkennen. Alle drei Modelle der Widerstandsverteilung im Untergrund

erklären die synthetischen Daten des letzten Zeitpunkts gleich gut und sind somit gleichwertige Äquivalenzmodelle. Die unterschiedlichen Regularisierungsparameter λ beeinflussen die Inversion jedoch deutlich. Bei der Wahl von $\lambda=10$ bilden sich deutliche Kontraste im Modell aus, und der Widerstand variiert um bis zu 70%. Die sich ausbildende geschichtete Struktur des Untergrunds kann leicht zu einer Fehlinterpretation von Messdaten führen. Mit ansteigendem λ erkennt man gut die zunehmende Glättung des Widerstandsmodells. In späteren Iterationsschritten verschlechtert sich die Anpassung für $\lambda = 1000$ ($RMS = 1,05\%$) im Vergleich zur Inversion mit $\lambda = 100$ ($RMS = 0,32\%$), so dass für die Inversion aller Zeitpunkte ein mittleres $\lambda = 100$ gewählt wurde, um eine ausreichend gute Anpassung zu erreichen. Die Inversion mit $\lambda = 10$ oszilliert und findet nach 10 Iterationen kein mögliches Modell-Update zur Verbesserung der Anpassung.

DC-Inversion aller Zeitpunkte

Als Startmodell für die Inversion aller Zeitpunkte wurde das Modell der Widerstandsverteilung der 13. Iteration der Inversion des letzten Zeitpunkts 3414 ms mit $\lambda = 100$ gewählt, welches die synthetischen Messdaten mit einem RMS von 0,32% erklärt. Beginnend mit dem vorletzten Zeitpunkt 2928 ms werden für alle weiteren Zeitpunkte bis zum ersten verwendeten Zeitpunkt mit 10 ms die synthetischen Messdaten invertiert. Das jeweils beste Modell der Widerstandsverteilung des vorherigen Zeitpunkts wurde für den folgenden Zeitpunkt verwendet. Dieses neu implementierte Update des Startmodells verhindert starke Variationen der zeitabhängigen Widerstandsmodelle zwischen aufeinanderfolgenden Zeitpunkten und verringert die Laufzeit signifikant (durchschnittlich um etwa 30%).

In Abbildung 4.2 sind die Modelle der Verteilung des zeitabhängigen Widerstands für 10 ms und 3414 ms in der ersten bzw. zweiten Zeile dargestellt. Die Belegung der Spalten ist analog zu Abbildung 4.1. Die normierte Coverage, welche durch Aufsummieren der auf die Zellgröße normierten Sensitivitäten berechnet wurde, ist in der dritten Zeile dargestellt (siehe auch Gleichung (4.13)). Sie nimmt mit der Tiefe ab und zeigt lateral eine gleichmäßige Verteilung. Zwischen 12 und 17 m ist eine Grenze in der Verteilung der Coverage zu erkennen, welche gut mit einer ungefähren maximalen Eindringtiefe von einem Sechstel der Profillänge von 17 m übereinstimmt. In der vierten Zeile sind für drei ausgewählte Sender-Empfänger-Kombinationen die synthetischen und berechneten Transienten dargestellt. Der durchschnittliche RMS der Transienten angepasst mit 39 zeitabhängigen Widerstandsmodellen betrug 3,00%. Stellvertretend für die durchschnittliche Anpassung der Transienten ist Transient 130 in (j) mit einem RMS von 2,83% abgebildet. Transient 811 (k) ist mit einem $RMS = 19,30\%$ der schlechtest angepasste Transient und Transient 1273

(l) mit einem RMS von 0,3% der am besten angepasste Transient.

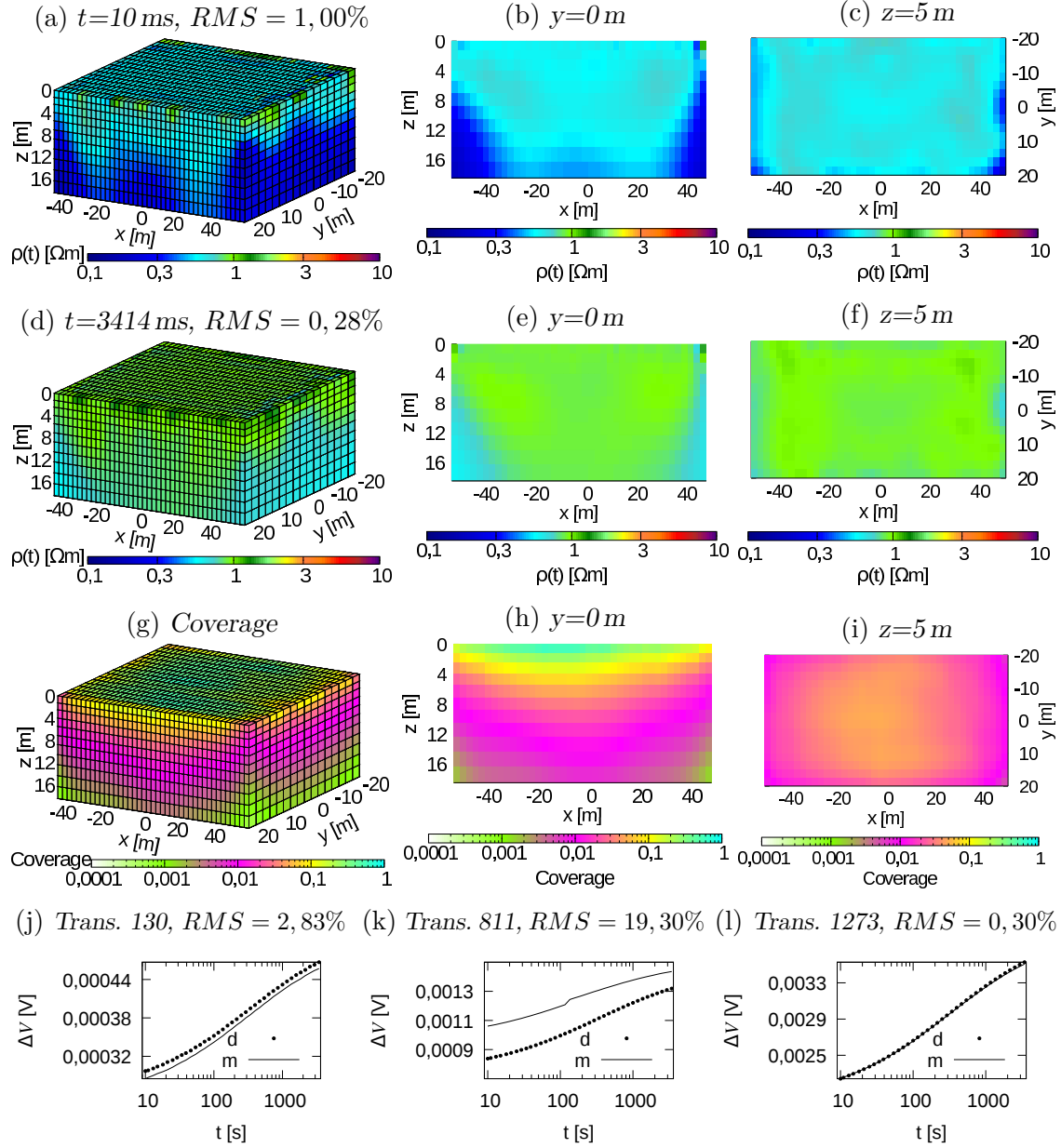


Abbildung 4.2.: Inversionsergebnis des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms (a-c) und für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms (d-f). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefschnitt bei $z=5\text{ m}$. Die Verteilung der normierten Coverage ist in der dritten Zeile abgebildet (g-i). Drei beispielhafte Transienten finden sich in Zeile vier (j-l). Die gemessenen Daten sind mit Punkten und die Modellantwort mit Linien dargestellt.

Es sind keine signifikanten Unterschiede zwischen der Anpassung früher und später Zeiten festzustellen. Wird für alle Zeitpunkte das beste Modell des letzten Zeitpunkts 3414 ms als Startmodell genutzt, sind die späten Zeitpunkte bei einer maximalen

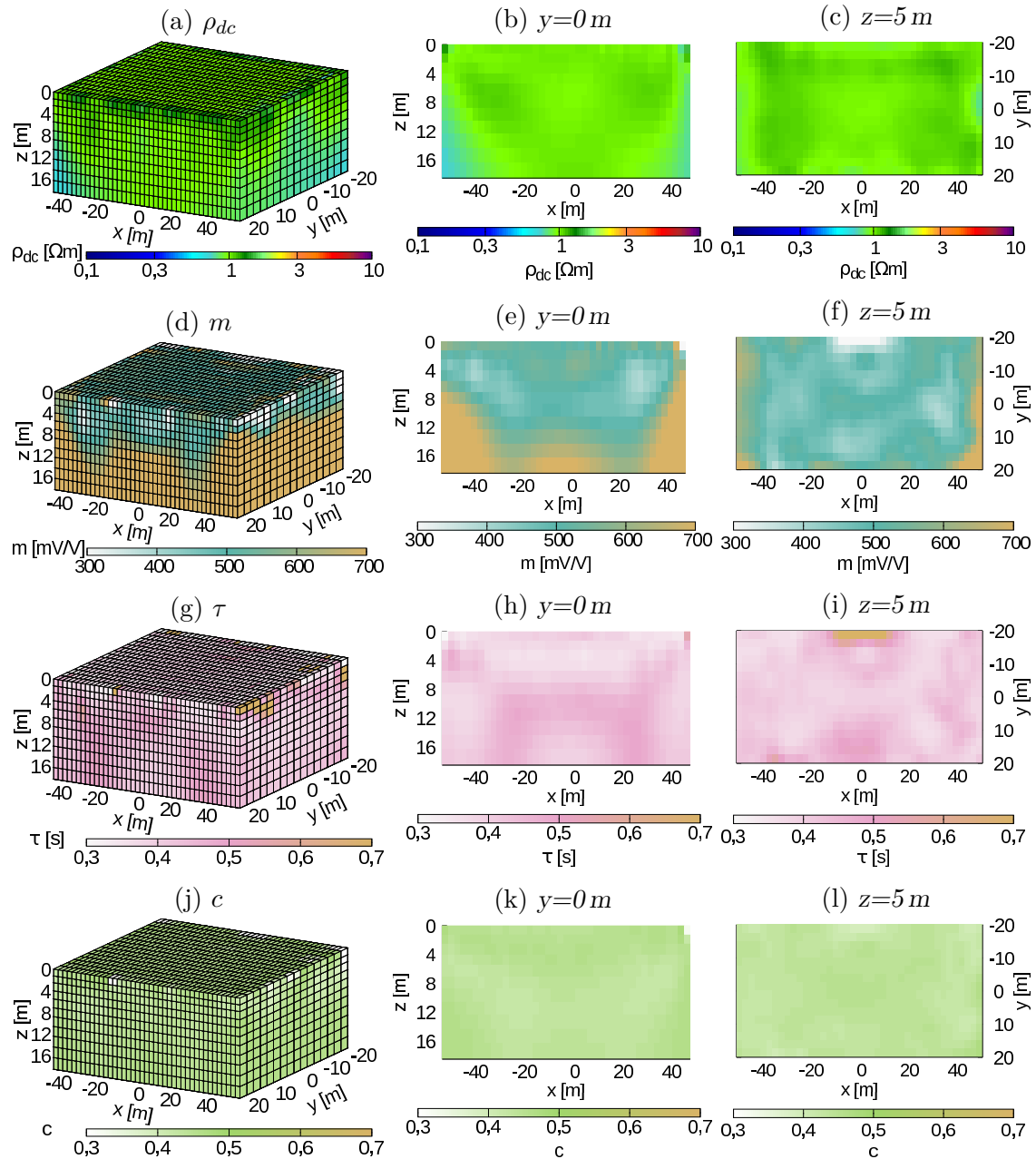
Iterationsanzahl von 10 stets deutlich besser angepasst als die früheren Zeiten. Die Angabe eines Grenzwerts für den RMS ab welchem die Inversion abgebrochen wird, unterstützt zudem eine vergleichbare Anpassung verschiedener Zeiten und reduziert die Laufzeit weiter.

Das Modell des zeitabhängigen Widerstands des ersten Zeitpunkts (a-c) zeigt leichte Variationen bezüglich des vorwärtsgerechneten zeitabhängigen Widerstands in Abbildung 3.3 (a-c), gibt diesen aber bis in eine Tiefe von etwa 12 m sehr gut wieder. Zwischen 12 und 17 m ist die Abweichung größer, aber das wahre Modell wird noch grundsätzlich abgebildet. Mit zunehmender Zeit werden die wahren zeitabhängigen Widerstände auch in größerer Tiefe sehr gut wiedergegeben. Für 3414 ms kann das vorwärtsgerechnete Modell bis zu einer Tiefe von 17 m sehr gut wiedergegeben werden.

IP-Inversion aller Zellen

Für jeden Zeitpunkt wird nun das Modell des zeitabhängigen Widerstands ausgewählt, welches die Daten am besten erklärt. Als Entscheidungskriterium wurde hierzu der RMS der DC-Inversion genutzt. Aus den 39 besten Modellen des zeitabhängigen Widerstands der DC-Inversionen wird nun für jede Zelle des Modellraums ein Zelltransient zusammengesetzt. Aufgrund der oben beschriebenen Vorgehensweise zeigen die zusammengesetzten Zelltransienten einen glatten Verlauf mit nur vereinzelt Stufen. Drei ausgewählte zusammengesetzte Zelltransienten sind in Abbildung 4.3 (m (schlecht angepasst), n (gut angepasst), o (durchschnittlich angepasst)) mit Punkten dargestellt. Die Zelltransienten, berechnet für die in (a-l) abgebildete Verteilung der IP-Modellparameter im Untergrund, sind durch Linien dargestellt. Die zusammengesetzten Zelltransienten konnten durch die Homogene-Halbraum-IP-Inversion im Durchschnitt mit einem RMS von 1,75% sehr gut angepasst werden.

Die Verteilung des Gleichstromwiderstands ρ_{dc} im Untergrund ist in der ersten Zeile von Abbildung 4.3 zu finden (a-c), die der Aufladbarkeit m in der zweiten (d-f), die der Relaxationszeit τ in der dritten (g-i) und die des Frequenzexponenten c in der vierten Zeile (j-k). Die Belegung der Spalten ist analog zu Abbildung 4.1. Der Gleichstromwiderstand von $1 \Omega m$ wird bis zu einer Tiefe von 17 m sehr gut aufgelöst. Bei der Bewertung der Variationen in lateraler und vertikaler Richtung muss beachtet werden, dass die Inversion jeder Zelle unabhängig von allen anderen Zellen durchgeführt wurde. Bei 22344 verwendeten Zellen setzen sich die in Abbildung 4.3 gezeigten Ergebnisse aus 22344 einzelnen Inversionen zusammen, zwischen denen keinerlei Glättung oder Regularisierung erfolgt.



(m) Zelle 2994, $RMS = 2,69\%$ (n) Zelle 15996, $RMS = 0,71\%$ (o) Zelle 18996, $RMS = 1,51\%$

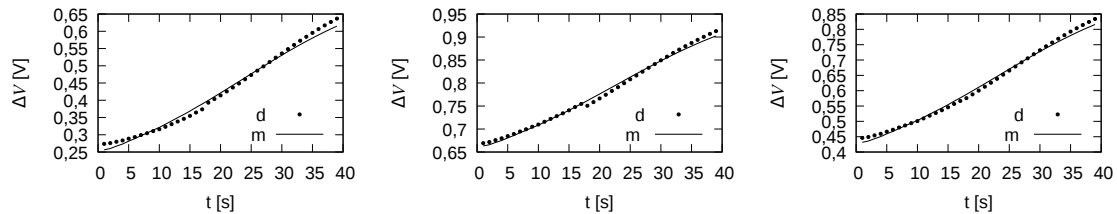


Abbildung 4.3.: Inversionsergebnis des Gleichstromwiderstands ρ_{dc} (a-c), der Aufladbarkeit m (d-f), der Relaxationszeit τ (g-i) und des Frequenzexponenten c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Drei zusammengesetzte Zelltransienten (Punkte) und die berechneten Zelltransienten (durchgezogene Linie) sind in (m-o) abgebildet.

Unter Berücksichtigung der großen Anzahl von Äquivalenzmodellen lassen sich die Variationen der einzelnen Parameter erklären. So gehen Bereiche mit erhöhten Gleichstromwiderständen wie beispielsweise bei $x=-40$ m, $y=0$ m und $z=6$ m mit einer erniedrigten Aufladbarkeit einher. Dies entspricht der Beziehung von ρ_{dc} und m in Gleichung (2.4). Innerhalb der aufgelösten Modellbereiche, entsprechend der Coverage in Abbildung 4.2, wird die Aufladbarkeit m bis in eine Tiefe von etwa 12 m gut getroffen. Der geringere Tiefenbereich lässt sich durch die Abhängigkeit auch von frühen Zeitpunkten erklären, während der Gleichstromwiderstand hauptsächlich von den späten Zeitpunkten beeinflusst wird. Der Frequenzexponent c mit 0,5 wird sehr gut getroffen und die Relaxationszeit τ von 0,5 s auf großen Gebieten bis zu 20% unterschätzt. Für ein Startwert der Relaxationszeit kleiner als der vorwärtsgerechnete Wert kam es im Großteil der durchgeführten Studien zu einer Unterschätzung von τ bei gut getroffenem m und c . Wurde der Startwert hingegen zu groß gewählt führte dies häufig zu einer Überschätzung der Relaxationszeit. Der große Wertebereich von 0 bis 10 s verdeutlicht den geringen Einfluss von Änderungen von τ im ms-Bereich auf die Form der berechneten Zelltransienten, so dass der optimale Wert meist nicht erreicht wird, sondern die Inversion aufgrund zu geringer Verbesserungen des RMS abgebrochen wird.

4.4.2. Blockmodell

Die synthetischen Transienten, berechnet für das Blockmodell aus Kapitel 3.2.2, wurden mit einem Rauschen von 5% behaftet und invertiert. Zur Bewertung der Anpassung wird nun neben dem RMS auch χ^2 genutzt, um den Einfluss des Rauschens auf die Inversion zu berücksichtigen. In einem unpolarisierbaren, homogenen Halbraum mit einem Gleichstromwiderstand $\rho_{dc,h}$ von 50 Ω m sind ein gut leitender, polarisierbarer Störkörper mit $\rho_{dc,1} = 10$ Ω m und ein schlecht leitender, polarisierbarer Störkörper mit $\rho_{dc,2} = 100$ Ω m eingebettet. Die Aufladbarkeit beider Blöcke beträgt 1000 $\frac{mV}{V}$ und Relaxationszeit und Frequenzexponent betragen je 0,5. Die Ausmaße und Lage der Blöcke sind Abbildung 3.6 zu entnehmen.

DC-Inversion des letzten Zeitpunkts

Analog zu Abbildung 4.1 sind in Abbildung 4.4 die Widerstandsmodelle des zeitabhängigen Widerstands des letzten Zeitpunkts für die Regularisierungsparameter $\lambda=10, 50, 1000$ dargestellt. Die Modelle des Untergrundes unterscheiden sich deutlich für die verschiedenen Inversionen und gehen mit steigendem λ von Modellen mit starken Kontrasten zwischen benachbarten Zellen zu sehr glatten Modellen über.

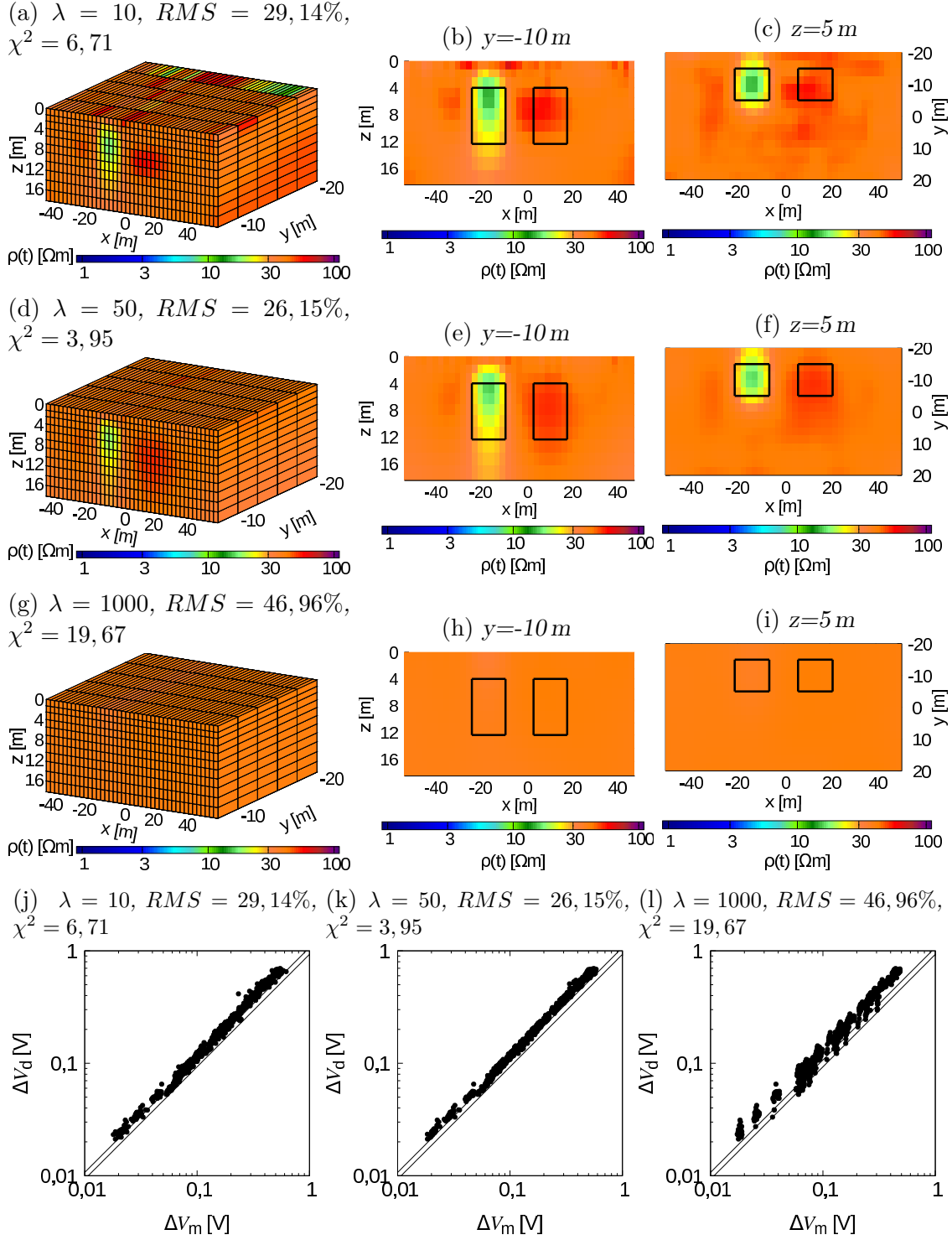


Abbildung 4.4.: (a - i) Die Verteilung des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms ist für Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ dargestellt ($\beta = \gamma = 1$). In der ersten Spalte ist ein Ausschnitt des inneren Modellraums abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y = -10\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z = 5\text{ m}$. (j - l) QQ-Plot der Inversion des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ .

Bei gleicher Iterationsanzahl (5) erklären die Modelle die synthetischen Daten unterschiedlich gut, was sich auch in den QQ-Plots widerspiegelt. RMS und χ^2 variieren über einen großen Bereich von 26,15% bis 46,96% bzw. 3,95 bis 19,67. Die kleinsten Werte werden für einen Regularisierungsparameter $\lambda = 50$ erreicht. Die Form der Blöcke wird mit steigendem λ stärker verschmiert, und auch der zeitabhängige Widerstand wird geglättet. Für $\lambda = 1000$ ist kein Block mehr zu erkennen. Aufgrund des starken Einflusses des Regularisierungsparameters λ ist es wichtig, diesen möglichst gut zu wählen. Eine Möglichkeit ist die Nutzung einer L-Curve, welche in Abbildung 4.5 dargestellt ist (Günther, 2004). Für verschiedene Regularisierungsparameter λ werden Inversionen mit einer geringen Anzahl an Iterationen durchgeführt. Der Term der Datenanpassung und der Glättungsterm aus Gleichung (4.4) werden für die Inversionen der verschiedenen Regularisierungsparameter gegeneinander aufgetragen. Passt man die Punkte durch zwei Geraden an, ergibt sich eine „L“-Form. Der Kreuzungspunkt der beiden Geraden kennzeichnet den idealen Regularisierungsparameter für das gestellte Problem. Für die folgenden Inversionen wurde entsprechend der L-Curve und der optischen Beurteilung der Inversionsergebnisse ein Regularisierungsparameter $\lambda = 50$ gewählt.

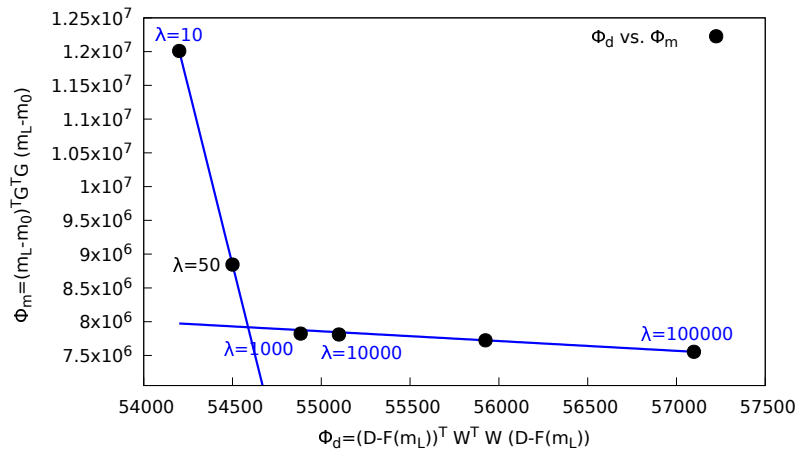


Abbildung 4.5.: Dargestellt als Punkte ist der Glättungsterm gegen den Term der Datenanpassung für die fünfte Iteration der Inversionen verschiedener Regularisierungsparameter, welche mit zwei Geraden angepasst wurden.

DC-Inversion aller Zeitpunkte

Als Startmodell der Inversion des vorletzten Zeitpunkts 2928 ms wurde das beste Modell der Inversion des letzten Zeitpunkts 3414 ms mit einem Regularisierungsparameter $\lambda = 50$ gewählt. Für alle folgenden DC-Inversionen der einzelnen Zeitpunkte wurde, wie oben beschrieben, das beste Modell der jeweils vorangegangenen Inversion als Startmodell genutzt. Abbildung 4.6 ist analog zu Abbildung 4.2 aufgebaut.

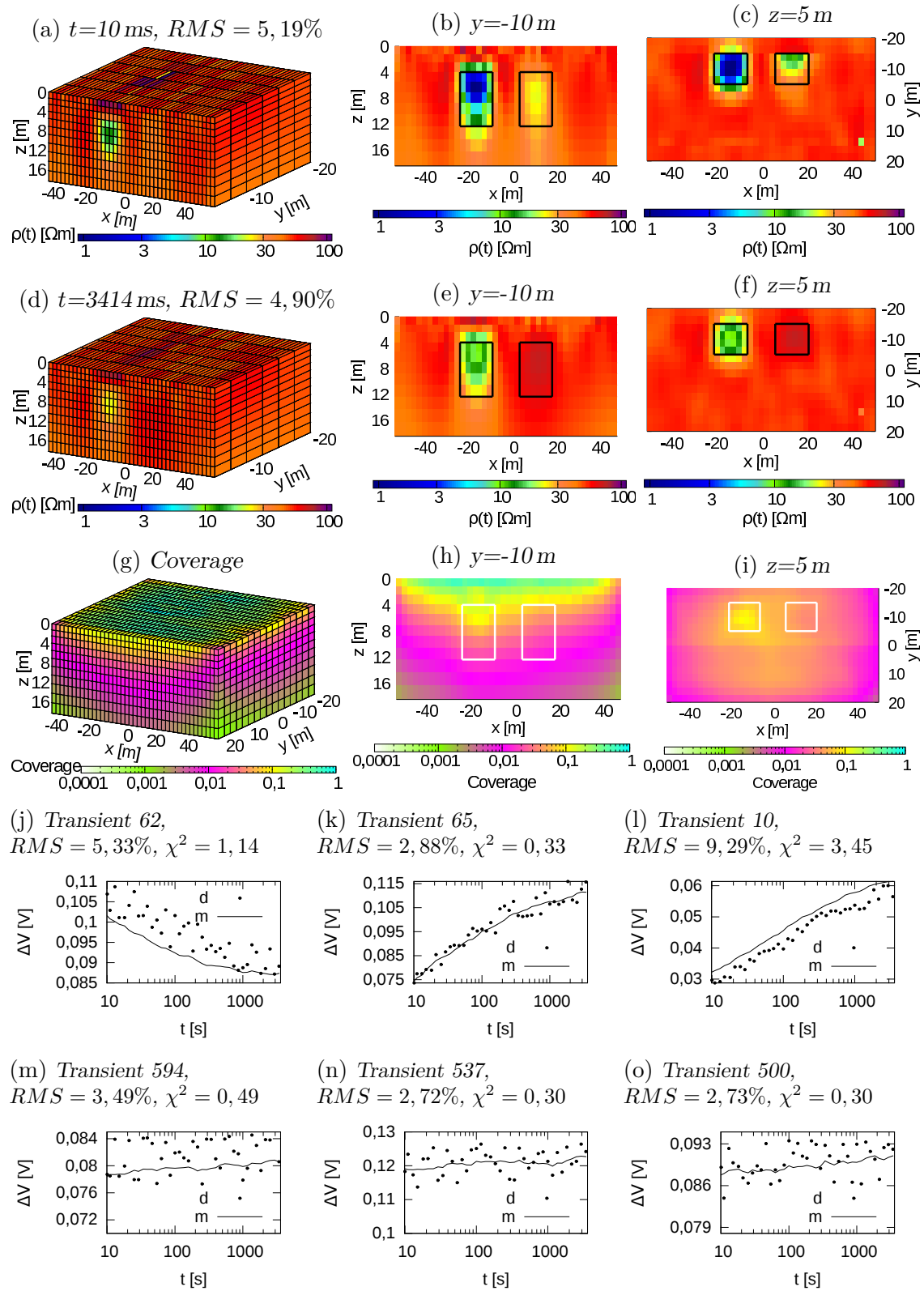
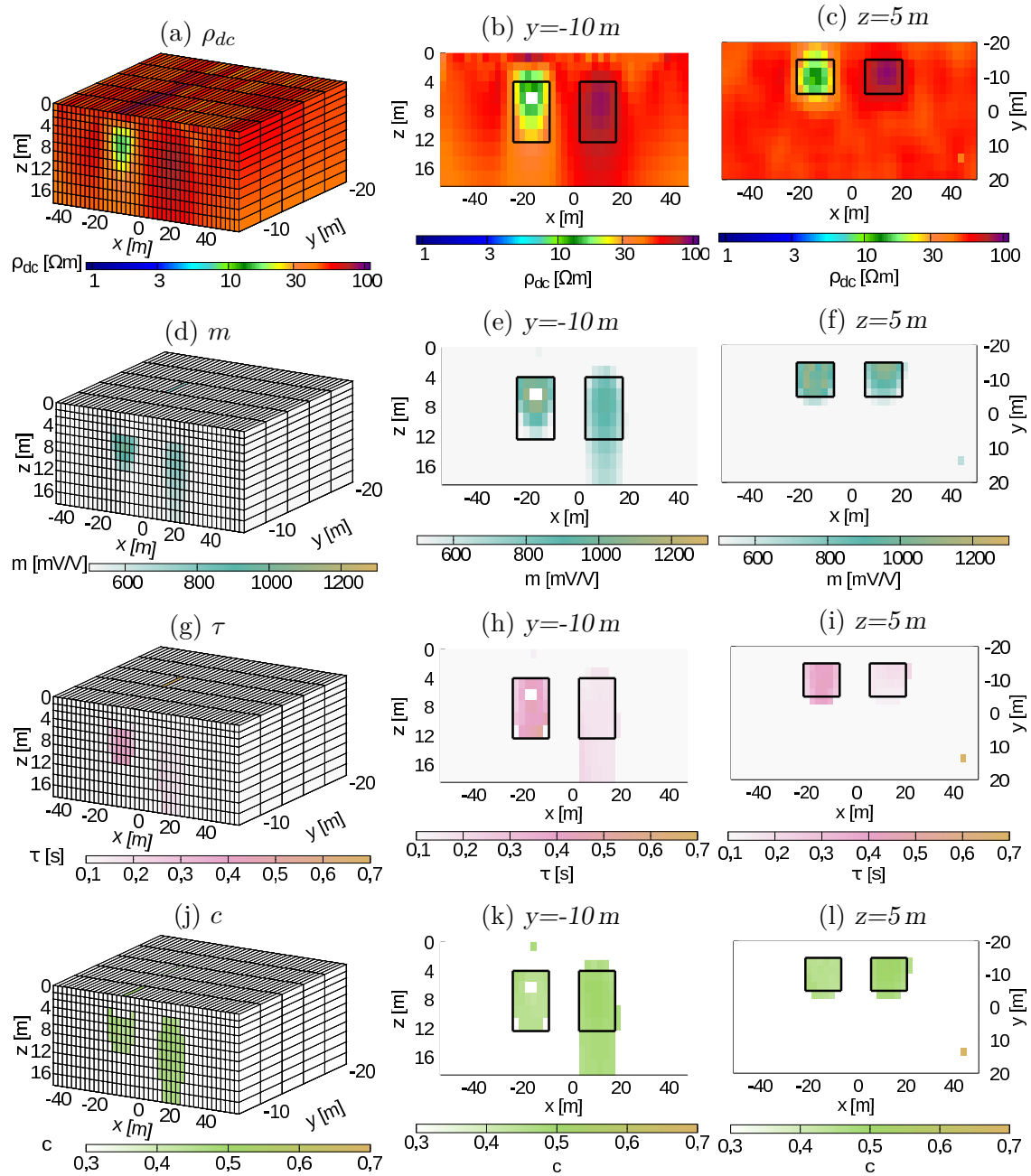


Abbildung 4.6.: Inversionsergebnis des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms (a-c) und für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms (d-f). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5\text{ m}$. Die Verteilung der normierten Coverage des letzten Zeitpunkts ist in der dritten Zeile abgebildet (g-i). Sechs beispielhafte Transienten finden sich in Zeile vier und fünf (j-o).

Die Transienten sind entsprechend denen in Kapitel 3.2.2 gewählt. Die Sender-Empfänger-Kombination des Transienten 62 (j) ist in Abbildung 3.7 (a) bei $y=-10$ m eingezeichnet und die des 594. Transienten (m) bei $y=10$ m. Im Rahmen des 5% Fehlerlevels können beide Transienten mit einem χ^2 knapp über bzw. unter Eins gut angepasst werden. Auch der Abfall des Transienten 62, welcher typisch bei der Überdeckung zweier Störkörper ist, kann wiedergegeben werden. Transient 65 (k) wurde für die Sender-Empfänger-Kombination in Abbildung 3.8 bei $y=-10$ m oberhalb des linken Störkörpers berechnet und Transient 537 (n) für $y=10$ m. Die Anpassung der Transienten ist mit χ^2 deutlich unter 0,5 sehr gut. Über dem rechten Störkörper befindet sich die Sender-Empfänger-Kombination von Transient 10 (l) und bei $y=10$ m die des Transienten 500 (o) (siehe Abbildung 3.9). Auch die Transienten oberhalb des rechten Blocks bzw. in 15 m Entfernung zu diesem können gut angepasst werden. Die zugehörigen Modelle der zeitabhängigen Widerstände geben beide Störkörper an den richtigen Positionen wieder. Die Ausdehnung in z-Richtung beider Blöcke wird leicht überschätzt. Während der zeitabhängige Widerstand des linken, leitfähigen Blocks gut wiedergegeben wird, wird die des rechten, schlecht leitenden Blocks für späte Zeiten unterschätzt. Unterhalb des linken Blocks kommt es zu einer Unterschätzung des zeitabhängigen Widerstands des Hintergrunds $\rho_{dc,h}$ für alle Zeitpunkte. Die Unterkante des rechten Blocks wird mit abnehmender Zeit schlechter aufgelöst und der zeitabhängige Widerstand unterhalb des rechten Blocks immer stärker unterschätzt. Der zeitabhängige Widerstand des rechten Blocks fällt für frühe Zeiten unter den zeitabhängigen Widerstand des Hintergrundes, so dass es zu einer Maskierung der Widerstandsverteilung auch unterhalb des rechten Blocks kommt (siehe auch Kapitel 2.2.3). Der zeitabhängige Widerstand unterhalb des linken Blocks wird für alle Zeitpunkte unterschätzt. Die Ausdehnung beider Blöcke in x- und y-Richtung wird sehr gut wiedergegeben. In der Darstellung der Coverage des letzten Zeitpunkts 3414 ms kann man die Position des linken, leitfähigen Blocks erkennen. Die für den homogenen Halbraum in Abbildung 4.2 noch symmetrische Verteilung der Coverage im Untergrund, wird durch die Anwesenheit des Blocks verformt und im Bereich des leitfähigen Blocks erhöht. Die erhöhte Sensitivität für gut leitende Strukturen ist erkennbar.

Die zeitabhängigen Widerstände der Blöcke und des Hintergrunds konnten unter Berücksichtigung des 5%igen Rauschens sehr gut aufgelöst werden. Auch die Lage und Ausdehnung der beiden Blöcke wird sehr gut reproduziert.



(m) Zelle 7665, $RMS = 3,83\%$ (n) Zelle 7675, $RMS = 4,41\%$ (o) Zelle 7685, $RMS = 0,71\%$
 $x = -13,25 \text{ m}$, $y = -10 \text{ m}$, $z = 5,5 \text{ m}$ $x = 13,25 \text{ m}$, $y = -10 \text{ m}$, $z = 5,5 \text{ m}$ $x = 39,75 \text{ m}$, $y = -10 \text{ m}$, $z = 5,5 \text{ m}$

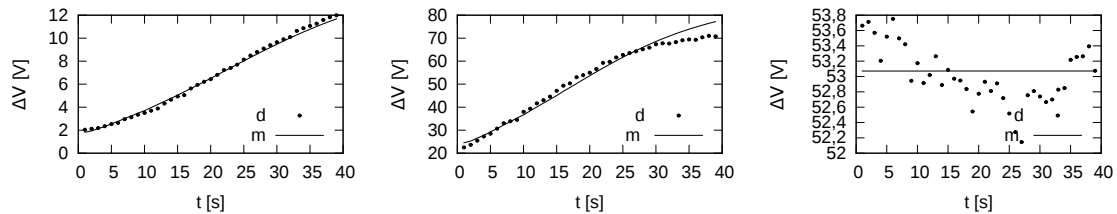


Abbildung 4.7.: Verteilung der IP-Modellparameter des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y = -10 \text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefschnitt bei $z = 5 \text{ m}$. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet.

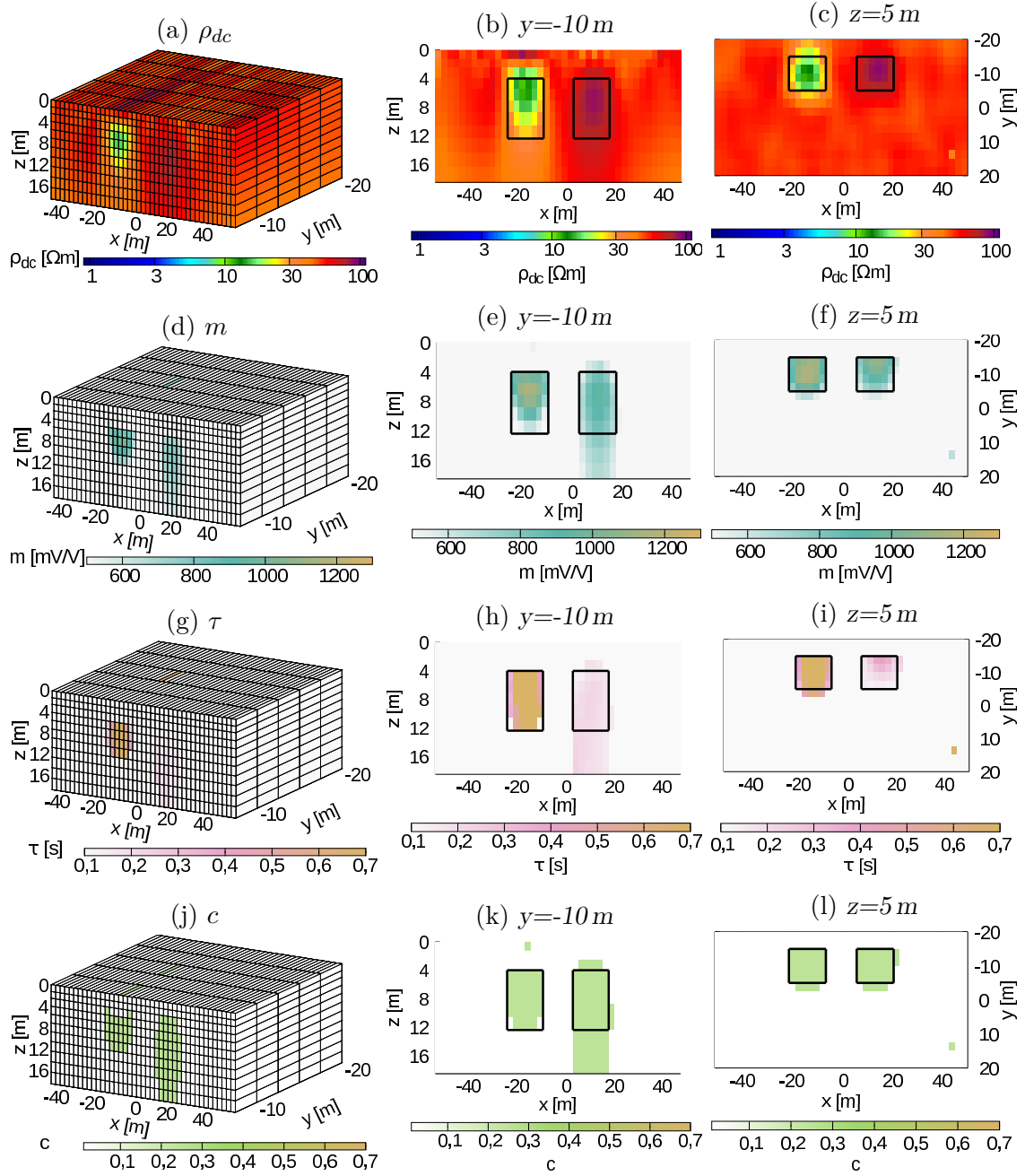
IP-Inversion aller Zellen mit dem Cole-Cole-Modell

Wie bereits für den homogenen Halbraum beschrieben, werden die 39 besten Modelle des zeitabhängigen Widerstands zu Zelltransienten der Zellen des Modellraums zusammengesetzt. Die Abbildungen 4.7, 4.8, B.1 und B.2 sind analog zu Abbildung 4.3 aufgebaut.

Die Verteilungen der IP-Parameter der Inversionen aller Zellen des Modellraums entsprechend des Cole-Cole-Modells in Gleichung (2.4) sind in Abbildung 4.7 dargestellt. Die zusammengesetzten Zelltransienten konnten durchschnittlich mit einem RMS von 1,31% angepasst werden. Von 2554 zusammengesetzte Zelltransienten mit einem IP-Effekt konnten 2546 angepasst werden, wobei die nicht angepassten acht Zellen in (a-1) ausgeblendet sind. Die Zelle 7665 (m) liegt mittig im Bereich des linken Störkörpers und kann mit einem $RMS = 3,83\%$ für alle Zeitpunkte gut angepasst werden. Die Anpassung des 7675. zusammengesetzten Zelltransienten im Bereich des rechten Störkörpers ist für späte Zeiten schlechter als für frühe Zeiten. Dies lässt sich durch die geringe Sensitivität der DC-Inversion für schlechte Leiter und einer damit einhergehenden Unterschätzung der zeitabhängigen Widerstände im DC-Modell für späte Zeiten erklären. Zelle 7685 liegt außerhalb der Störkörper im unpolarisierbaren Bereich des Modellraums, und der zusammengesetzte Zelltransient kann mit einem $RMS = 0,71\%$ durch ein reines DC-Modell angepasst werden.

Der Gleichstromwiderstand des Hintergrunds wird grundsätzlich gut getroffen, nur im Bereich unterhalb der Blöcke wird er unter- bzw. überschätzt. Die Ausdehnung und Lage beider Blöcke und der Gleichstromwiderstand des linken Blocks werden sehr gut getroffen. Der Gleichstromwiderstand des rechten Störkörpers wird unterschätzt, aber eine Erhöhung des Gleichstromwiderstands ist deutlich erkennbar.

Die Aufladbarkeit des Hintergrunds wird mit maximal $50 \frac{mV}{V}$ sehr gut wiedergegeben. Auch in Bereichen kleiner Aufladbarkeiten von unter $50 \frac{mV}{V}$ werden die Relaxationszeit und der Frequenzexponent mit realistischen kleinen Werten unter 0,1 angepasst. Durch die Wahl des guten Startmodells jeder Zelle nach Kapitel 4.3.2 kann auf eine Beschränkung für τ oder c für $m < 100 \frac{mV}{V}$, wie in Hönig (2002) benötigt, verzichtet werden. Die horizontale Ausdehnung und Lage beider Störkörper wird durch die IP-Parameter sehr gut getroffen. Der gut leitende linke Block wurde in vertikaler Ausdehnung, Lage und Wert der IP-Parameter sehr gut aufgelöst. Die Unterkante des rechten, schlecht leitenden Störkörpers kann nicht korrekt aufgelöst werden, und die Relaxationszeit wird mit 0,25 s deutlich unterschätzt. Aufladbarkeit und Frequenzexponent weichen um etwa 20% von den vorwärtsgerechneten Modellparameteren ab.



(m) Zelle 7665, $RMS = 24,67\%$ (n) Zelle 7675, $RMS = 19,04\%$ (o) Zelle 7685, $RMS = 0,71\%$
 $x = -13,25\text{ m}$, $y = -10\text{ m}$, $z = 5,5\text{ m}$ $x = 13,25\text{ m}$, $y = -10\text{ m}$, $z = 5,5\text{ m}$ $x = 39,75\text{ m}$, $y = -10\text{ m}$, $z = 5,5\text{ m}$

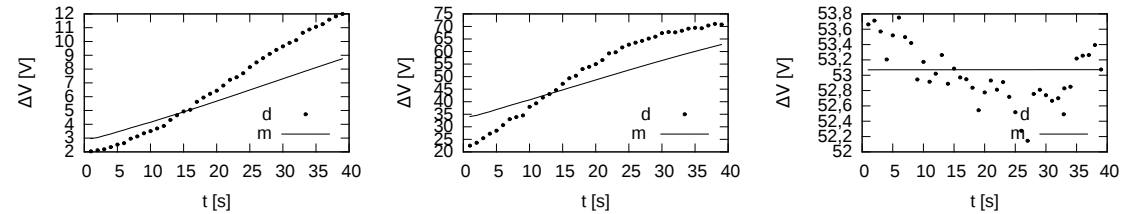


Abbildung 4.8.: Verteilung der IP-Modellparameter des Madden-Cantwell-Modells ($c = 0, 25$). Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a - c), die Aufladbarkeit m (d - f), die Relaxationszeit τ (g - i) und der Frequenzexponent c (j - l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y = -10\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z = 5\text{ m}$. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m - o) abgebildet.

Die Abweichungen des Modells der IP-Inversion vom vorwärtsgerechneten Modell in Kapitel 3.2.2 treten nur im Bereich des schlecht leitenden Störkörpers auf und lassen sich durch die Abnahme des zeitabhängigen Widerstands mit abnehmender Zeit erklären. Die Abnahme führt zu einer zunehmenden Maskierung des zeitabhängigen Widerstands unterhalb des rechten Blocks, welcher für frühe Zeiten aufgrund der Polarisierbarkeit zu einem guten Leiter wird. Der zeitabhängige Widerstand unterhalb des rechten Blocks wird mit zunehmender Zeit erniedrigt, so dass es zu einer Dynamik des Transienten kommt. Während der IP-Inversion werden die zusammengesetzten Zelltransienten mit einem IP-Modell erklärt, so dass es zu einer Verschmierung des rechten Blocks kommt.

IP-Inversion aller Zellen mit dem Madden-Cantwell-Modell

Wird für die IP-Inversion aller Zellen das Madden-Cantwell-Modell mit einem Frequenzexponent $c = 0,25$ zugrunde gelegt, ergibt sich die in Abbildung 4.8 gezeigte Verteilung der IP-Parameter im Untergrund. Die Abbildung ist analog zu der Abbildung 4.7 aufgebaut und es wird im Folgenden nur auf signifikante Unterschiede zwischen den Inversionsergebnissen eingegangen. Mit einem durchschnittlichen *RMS* von 3,47% konnten alle 2554 zusammengesetzten Zelltransienten, welche eine Dynamik größer als 1% aufweisen, angepasst werden. Die schlechtere Anpassung zeigt sich deutlich für die Transienten in Abbildung 4.8 (m-n) für welche sich der *RMS* mehr als vervierfacht hat. Das Inversionsergebnis des Gleichstromwiderstands und der Aufladbarkeit wird kaum von der Wahl des zugrunde liegenden Modells beeinflusst. Die Relaxationszeit ist stark mit dem Frequenzexponenten korreliert, und die Verteilung im Untergrund zeigt deutliche Unterschiede. Die Relaxationszeit wird für beide Blöcke relativ zu Abbildung 4.7 um bis zu 85% erhöht, was aufgrund der Wahl der Farbskala für den rechten Block visuell weniger gut zu erkennen ist. Für den linken Block kommt es zu einer Überschätzung der Relaxationszeit, während diese für den rechten Block weiterhin unterschätzt wird. Die Wiedergabe der Form der Störkörper wird von der Wahl des Modells nicht beeinflusst.

Auch eine Inversion mit den ebenfalls neu implementierten Modellen nach Debye und Warburg zeigt keine signifikanten Unterschiede bezüglich Auflösbarkeit von Form und Lage der Störkörper. Die Inversionsergebnisse sind im Anhang in Abbildung B.2 und B.1 zu finden. Auch die Verteilung des Gleichstromwiderstands und der Aufladbarkeit ist bei guter Wahl des Startmodells von der Wahl des zugrunde liegenden IP-Modells unbeeinflusst.

4.4.3. Diskussion der Modellstudien mit *IP3DInv_{DC}* und *IP3DInv_{IP}*

Die in Kapitel 3.2 vorwärtsgerechneten Modelle konnten durch die Inversion mit *IP3DInv_{DC}* und *IP3DInv_{IP}* reproduziert werden. Der zeitabhängige Widerstand wird mit zunehmender Zeit für größere Tiefen korrekt wiedergegeben. Die sensitiven Bereiche entsprechend der Coverage stimmen gut mit den ungefähren Eindringtiefen und den aufgelösten Bereichen des zeitabhängigen Widerstands überein (siehe Abbildung 4.2). Die Wahl des Regularisierungsparameters beeinflusst den Inversionsverlauf entscheidend, so dass eine Wahl entsprechend des L-Curve-Verfahrens empfohlen wird. Zudem wird eine visuelle Beurteilung der Ergebnisse bei gleichem *RMS*, wie in Abbildung 4.4, empfohlen.

Der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} konnte in allen durchgeführten Studien sehr gut reproduziert werden. Die Lage und Ausdehnung dreidimensionaler Störkörper wird gut wiedergegeben. Bei polarisierbaren Störkörpern mit einem relativ zum Hintergrund erhöhten Gleichstromwiderstand kann es, aufgrund der zunehmenden Maskierung der tieferliegenden Modellbereiche für frühe Zeiten, zu Inversionsartefakten kommen. Betroffen davon sind vor allem die Relaxationszeit und der Frequenzexponent, wohingegen der Gleichstromwiderstand und die Aufladbarkeit weniger stark beeinflusst werden. Die Relaxationszeit wird schlechter angepasst, da kleine Änderungen im ms-Bereich nur einen geringen Einfluss auf die Form der berechneten Zelltransienten haben. Durch zwei Inversionen mit extremen Startwerten für τ kann ein möglicher Wertebereich abgeschätzt werden.

Auch kleine IP-Effekte können ohne Beschränkung für Relaxationszeit und Frequenzexponenten invertiert werden und liefern realistische Parameterkombinationen, wie in Abbildung 4.7 abgebildet. Neben dem Cole-Cole-Modell wurde das Madden-Cantwell-Modell implementiert, welches mit einem $c = 0,25$ für die meisten Gesteine gut verwendet werden kann. Bei einer Interpretation der Ergebnisse sollten die IP-Parameter jedoch immer im Verhältnis zueinander betrachtet werden, um mögliche Inversionsartefakte zu erkennen. Auch sollte die große Anzahl an Äquivalenzmodellen und die damit möglichen Variationen berücksichtigt werden (siehe Abbildung 4.3).

5. Inversion von Felddaten aus Krauthausen

Im Oktober 2012 wurden an neun Messtagen auf neun parallelen Profilen Zeitreihen der Induzierten Polarisation auf dem Testfeld Krauthausen des Forschungszentrums Jülich aufgezeichnet. Eine Beschreibung der Geologie, Lage und Widerstandsverteilung des Testfelds findet sich in Kapitel 5.1. Da es sich um das Testfeld des Forschungszentrums handelt, kann auf eine Vielzahl von Veröffentlichungen zurückgegriffen werden und der Aufbau des Untergrunds ist bekannt.

Der Messaufbau und die verwendeten Geräte werden in Kapitel 5.2 beschrieben. Das *Terrameter LS* der Universität Lund wurde von Prof. T. Dahlin zur Verfügung gestellt und es fand im Frühjahr 2012 eine gemeinsame Voruntersuchung in Köln-Longerich statt. Die gewonnenen Erkenntnisse bezüglich der Verwendung von Edelstahlelektroden als Potentialelektroden werden ebenfalls vorgestellt.

Die aufgenommenen Zeitreihen sind mit einem Rauschen behaftet. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde deshalb eine Preprocessing-Routine entwickelt (siehe 5.3). Beispielhaft an einer ausgewählten Zeitreihe werden die einzelnen Schritte des Preprocessings erklärt und deren Wirkung verdeutlicht.

Die Inversion der prozessierten und editierten Daten mit *IP3DInv* findet sich in Kapitel 5.4. Analog zu dem in Kapitel 4.4 beschriebenen Vorgehen, werden die Zeitreihen in ein IP Modell des Untergrunds invertiert. Die Wahl der Regularisierungsparameter wird erläutert und die Inversion aller Zeitpunkte für zwei verschiedene Startmodelle diskutiert. Anschließend werden die Ergebnisse der IP-Inversion vorgestellt.

Ein Vergleich der Inversionsergebnisse der Messdaten aus 2012 invertiert mit *RES2DINV* und *IP3DInv* findet sich in Kapitel 5.5. Abschließend werden die Inversionsergebnisse in Bezug auf vorherige Messungen und die bekannte Struktur des Untergrunds diskutiert.

5.1. Das Messgebiet: Testfeld des Forschungszentrums Jülich

Aufgrund zahlreicher Messungen und Bohrungen auf dem Testfeld des Forschungszentrums Jülich ist die Struktur des Untergrunds bekannt. Im Folgenden findet sich eine kurze geologische Einordnung des Messgebiets. Beispielhaft werden die Ergebnisse aus drei vorangegangenen Messungen verschiedener Methoden vorgestellt.

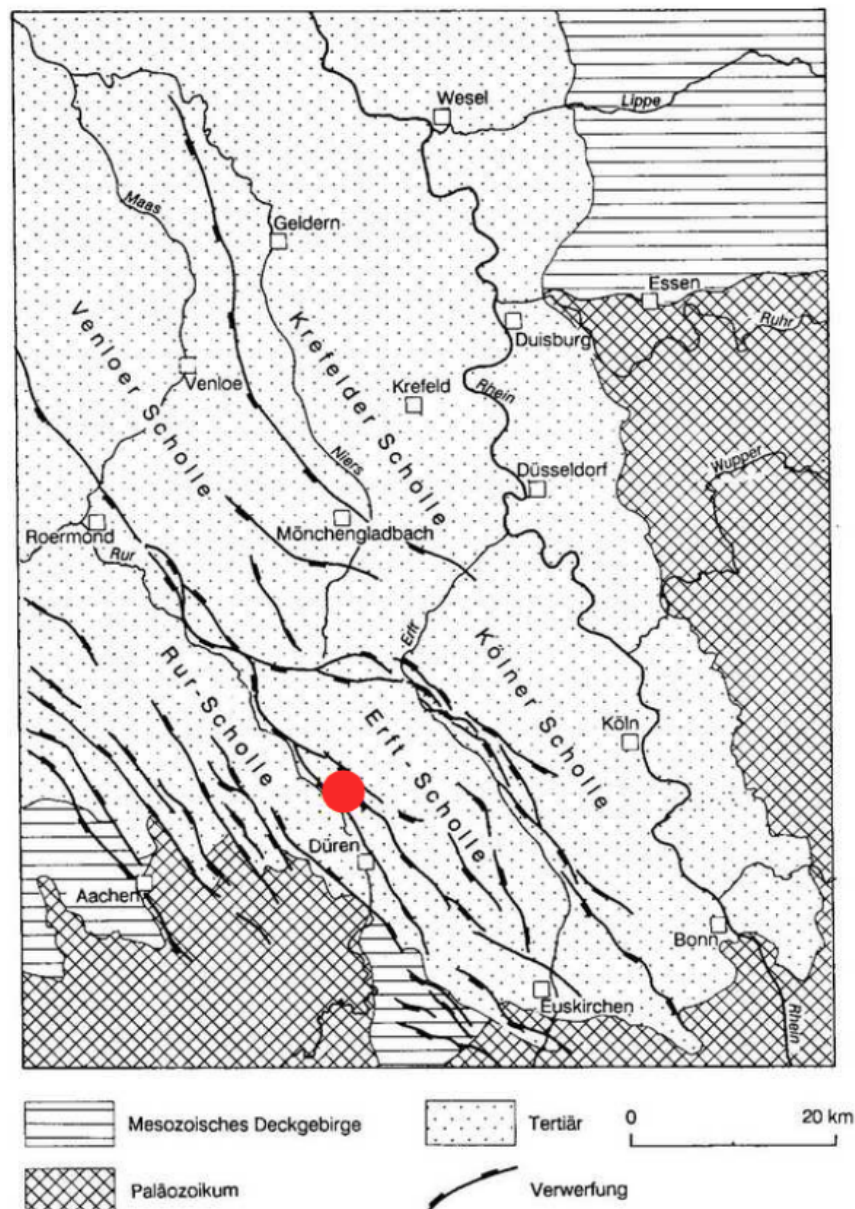


Abbildung 5.1.: Auf der tektonischen Übersichtskarte der Niederrheinischen Bucht ist die Lage des Testfelds Krauthausen mit einem roten Punkt markiert (Walter, 1992).

5.1.1. Geologie des Messgebiets

Das Testfeld des Forschungszentrums Jülich, 7 km südöstlich von Jülich und 10 km nordwestlich von Düren gelegen, hat Ausmaße von 70 m x 200 m. In Abbildung 5.1, welche eine geologische Karte der Niederrheinischen Bucht zeigt, und in Abbildung 5.3, welche einen geologischen Schnitt der Niederrheinischen Bucht zeigt, ist die Lage bzw. Projektion des Testfelds mit einem roten Punkt markiert. Es befindet sich in der südlichen Niederrheinischen Bucht, welche durch tektonische Bewegungen seit dem Tertiär abgesenkt wurde. Der Gebirgssockel ist mit bis zu 1000 m mächtigen Sedimenten überdeckt, welche aus Wechselfolgen von Tonen, Sanden, Kiesen und Braunkohlen bestehen. Kiese und Sande bilden Aquifere aus, wohingegen Tone und Braunkohle als Grundwasserstauer fungieren. Die Niederrheinische Bucht ist durch Hauptstörungen in Rur, Erft und Kölner Scholle unterteilt. Das Testfeld befindet sich auf einer Zwischenscholle zwischen Rur- und Erftscholle (Blaschek, 2006). Durch über 80 Bohrungen bis in 22 m Tiefe ist der Aufbau des Untergrunds sehr gut bekannt. Ein aus allen Bohrungen ermitteltes Normalprofil ist in Abbildung 5.2 skizziert. Ein etwa 9 m mächtiger, dreischichtiger Aquifer in etwa 1,5-11 m Tiefe ist von einer Mutterbodenschicht bedeckt und wird abgeschlossen von einer Tonschicht. Der Grundwasserspiegel schwankt saisonal mit einer Tiefe unterhalb der Geländeoberkante von 1,3 m im Winter und 2,6 m im Sommer. Die erste Schicht des Aquifers mit einer Mächtigkeit von 3,5 m setzt sich aus steinigen Mittelkiesen und Mittelsanden zusammen und wird den Rursedimenten zugeordnet. Innerhalb der Schicht liegen starke Inhomogenitäten der Korngrößenverteilung von sehr kleinen unter $50\ \mu\text{m}$ bis zu sehr großen über 5 mm vor (Hördt et al., 2007; Vereecken et al., 2000). In einer Tiefe von 5 m beginnt die 3 m mächtige zweite Schicht, welche aus Feinkies besteht und Teil der oberen Rheinsedimente ist. Die dritte Schicht setzt sich aus Mittelkies und einer Wechsellagerung von Sand- und Kieslagen zusammen. Sie wird den unteren Rhein-

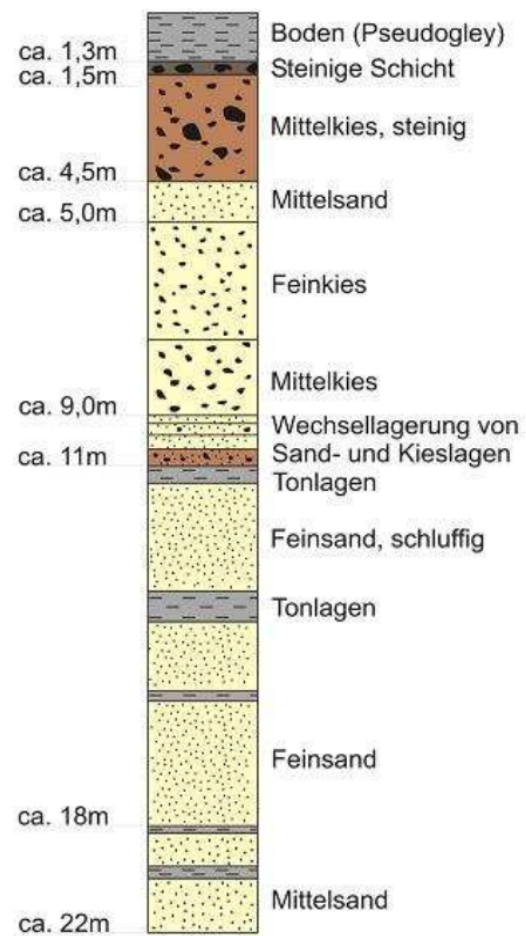


Abbildung 5.2.: *Lithologisches Normalprofil des Testfelds in Krauthausen (Blaschek, 2006; Höpner, 2001)*

sedimenten zugeordnet und hat eine Mächtigkeit von 2 m. Der Grundwassersstauer in 11-13 m Tiefe setzt sich aus Schluff (Silt) in feiner wechselnder Schichtung mit Ton zusammen. Die Tonlagen wurden jedoch nicht durch alle 80 Bohrungen bestätigt und auch Tracerversuche deuten auf Heterogenitäten der hydraulischen Durchlässigkeit hin. Eine ausführliche Beschreibung des Testfelds findet sich unter anderem in Vereecken et al. (2000). Dort wird auch auf die hohe Konzentration von Chloriden (70-100 ppm) und Nitrat (90-100 ppm) auf Grund der starken landwirtschaftlichen Beanspruchung der Region hingewiesen, welche mit einem Grundwasser vom Calcium-Bicarbonat-Typ mit hohem Sulfat Anteil und einem pH Wert von 6,7 einhergehen.

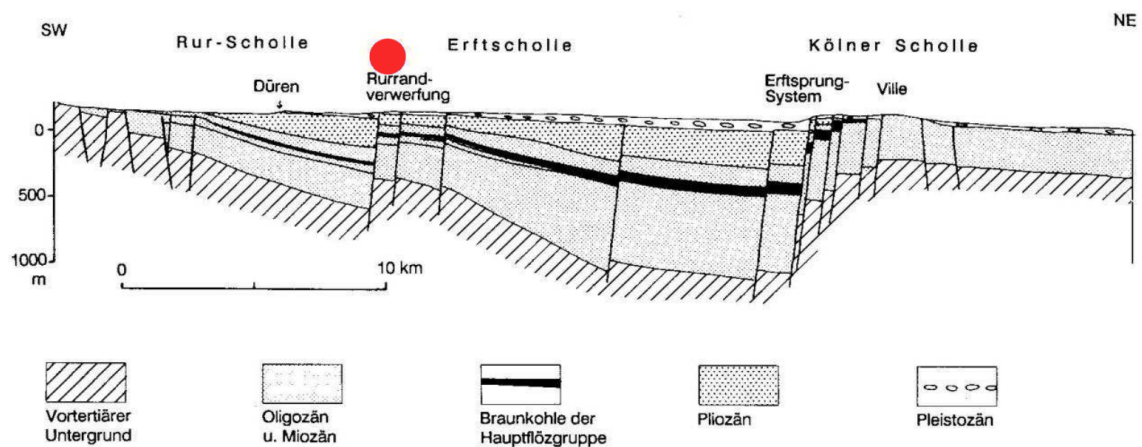


Abbildung 5.3.: Geologisches Profil durch die Niederrheinische Bucht von SW nach NO. Die Projektion des Testfelds Krauthausen ist mit einem roten Punkt markiert (Walter, 1992).

5.1.2. Informationen aus vorherigen Messungen

Abbildung 5.4 zeigt neben der Lokation der in 2012 vermessenen Profile die Verteilung der Messpunkte von Gößling (2004), Nix (2005), Blaschek (2006) und Hördt et al. (2007). Die Lage der im Rahmen dieser Arbeit aufgezeichneten Profile 1-9 orientiert sich an der vorheriger Messungen und ist mit blauen Linien eingezeichnet. Mit -51,25 m und 51,25 m sind die Start- und Endpunkte der Profile 1-9 gekennzeichnet. Im Rahmen zweier Diplomarbeiten wurden an der Universität zu Köln bereits Geoelektrische-Tomographie- und Radiomagnetotellurik-Messungen durchgeführt (Gößling, 2004; Nix, 2005). Die Messlokationen der Geoelektrischen-Tomographie-Messungen sind durch schwarze Linien und die der Radiomagnetotellurik durch grüne Punkte gekennzeichnet. Blaschek (2006) und Hördt et al. (2007) führten SIP-Messungen durch, welche in Abbildung 5.4 magentafarben gekennzeichnet sind.

In Abbildung 5.5 ist das 2D Inversionsergebnis der Geoelektrischen-Tomographie-Messung aus dem Jahr 2002 abgebildet. Zusätzlich sind die Ergebnisse weniger Monate zuvor durchgeführter Direct-Push-Messungen gezeigt. Stark vereinfacht sind drei Schichten zu erkennen, wobei die Mächtigkeit der schlecht leitenden zweiten Schicht der Ergebnisse beider Methoden stark variiert. Die erste Schicht hat eine Mächtigkeit von etwa 1 m und einen Widerstand von ca. 60 Ω m. Es folgt ein schlechter Leiter mit einem Widerstand von grob 400 Ω m

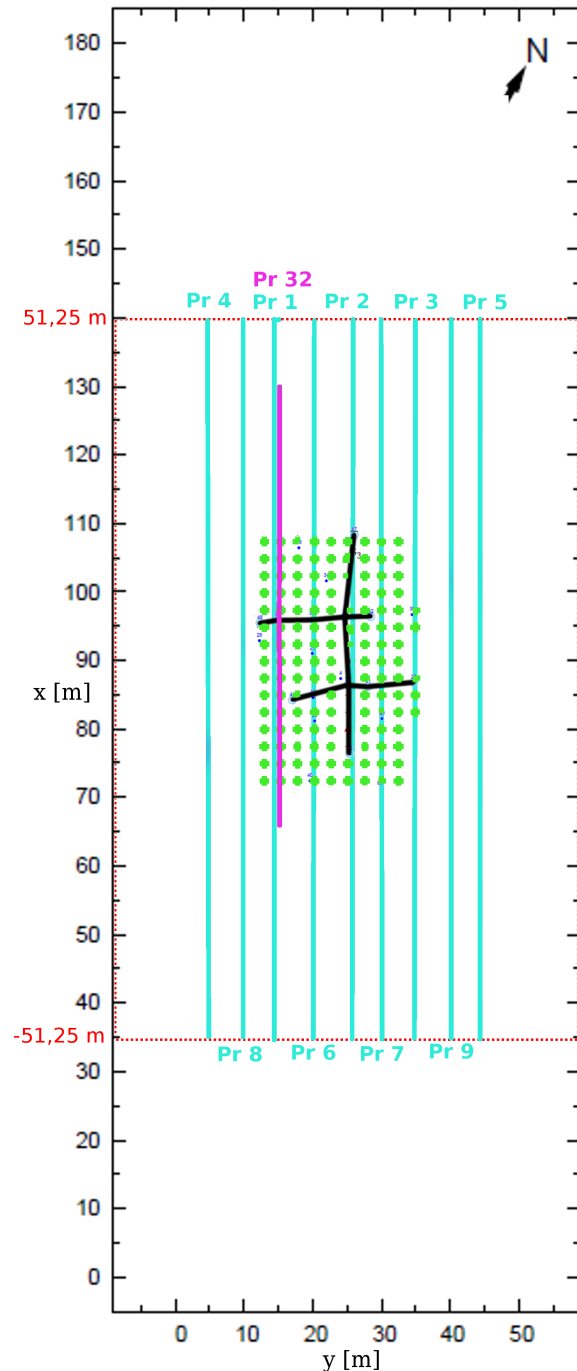


Abbildung 5.4.: Lage der Messpunkte von Gößling (2004) (schwarze Linien), Nix (2005) (grüne Punkte), Blaschek (2006) und Hördt et al. (2007) (magentafarbene Linie) sowie der Messung 2012 im Rahmen dieser Arbeit (blaue Linien).

und einer Mächtigkeit von knapp 2 m. Darauf folgt wieder ein guter Leiter mit einem Widerstand von etwa $60 \Omega\text{m}$, dessen Unterkante von der Direct-Push Messung bei ca. 11 m aufgelöst wird (Göbbling, 2004).

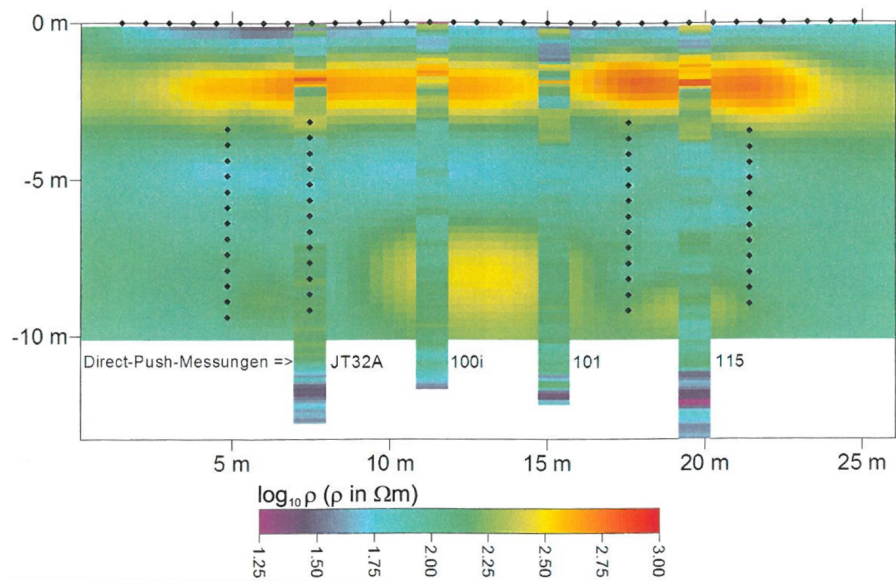


Abbildung 5.5.: 2D Inversionsergebnis des Längsprofils der Geoelektrischen Tomographie-Messung aus dem Jahr 2002 und Ergebnisse mittels der Direct-Push-Methode durchgeführter Messungen des spezifischen Widerstands (Göbbling, 2004). Die Lage des Längsprofils stimmt mit Profil 2 in Abbildung 5.4 überein.

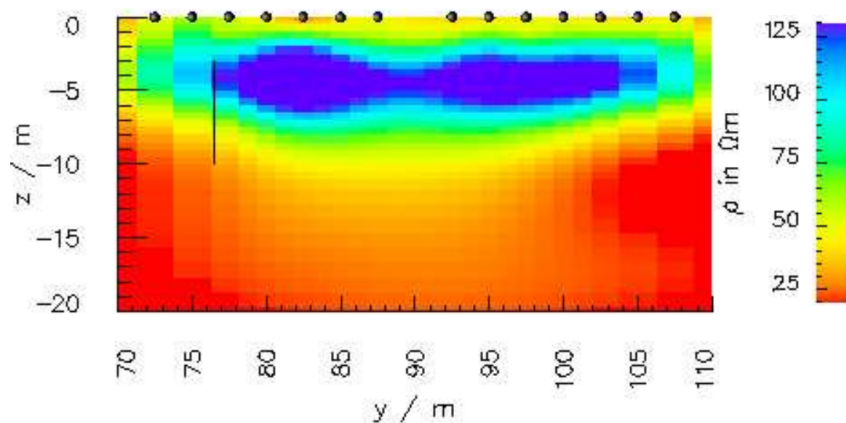


Abbildung 5.6.: 2D Inversionsergebnis des spezifischen Widerstands der Radiomagnetotellurik-Messung aus dem Jahr 2002 (Nix, 2005). Die Lage der schwarzen Punkte stimmt mit Profil 2 in Abbildung 5.4 überein.

Das 2D Inversionsergebnis der Radiomagnetotellurik-Messung ebenfalls aus dem Jahr 2002 ist in Abbildung 5.6 dargestellt (Nix, 2005). Zu beachten ist hierbei die umgekehrte Farbskala des Widerstands, welche schlecht leitende Strukturen blau

abbildet. Auch hier ist vereinfacht ein Drei-Schicht-Fall zu erkennen. Einer gut leitenden Schicht mit einem Widerstand von ungefähr $40 \Omega\text{m}$ und einer Mächtigkeit von etwa 2 m, folgt ein schlechter Leiter mit einem Widerstand von über $120 \Omega\text{m}$. Ab einer Tiefe von ungefähr 6 m folgt wieder ein guter Leiter mit $25 \Omega\text{m}$, welcher sich bis in eine Tiefe von 20 m fortsetzt.

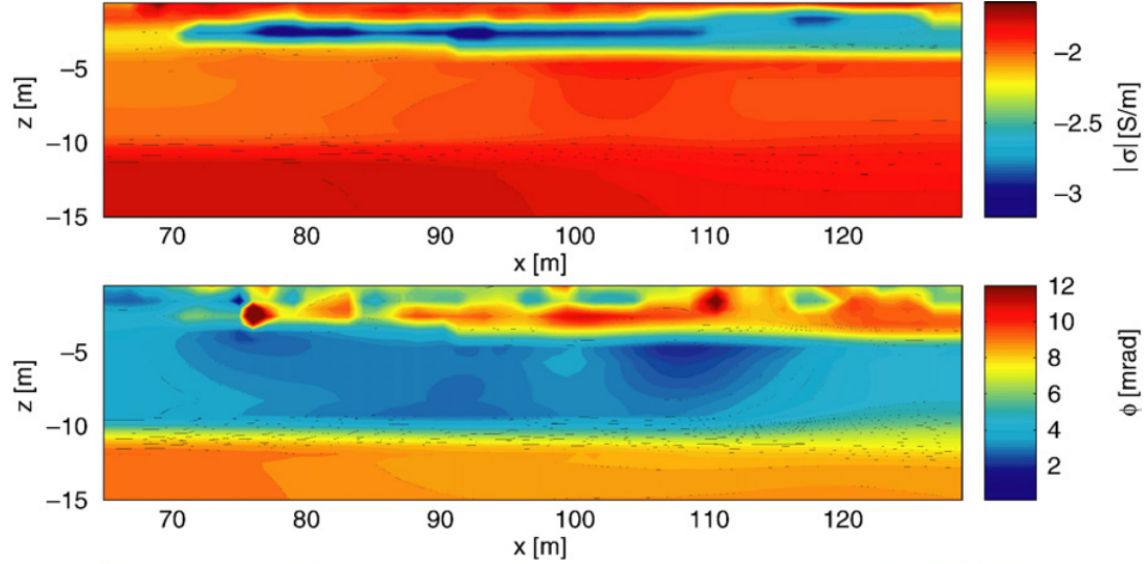


Abbildung 5.7.: Dargestellt ist das 2D Inversionsergebnis der SIP-Messung für Profil 32. Oben: \log_{10} der Magnitude der Leitfähigkeit. Unten: Phase (Hördt et al., 2007). Die Lage des Profils 32 stimmt mit Profil 1 in Abbildung 5.4 überein.

Das 2D Inversionsergebnis der SIP-Messung der Frequenz 312 mHz ist in Abbildung 5.7 dargestellt. Das Ergebnis der Magnitude der Leitfähigkeit kann grob durch einen Vier-Schicht-Fall beschrieben werden. Einem guten Leiter mit etwa $100 \Omega\text{m}$ ($10^{-2} \frac{\text{S}}{\text{m}}$) folgt ab etwa 1,5 m Tiefe ein schlechter Leiter mit einer Mächtigkeit von 1,5 m und einem Widerstand von grob $560 \Omega\text{m}$ ($10^{-2,75} \frac{\text{S}}{\text{m}}$). Die dritte Schicht hat einen Widerstand von etwa $140 \Omega\text{m}$ ($10^{-2,1} \frac{\text{S}}{\text{m}}$) und erstreckt sich bis etwa 10 m Tiefe. Es schließt sich eine Schicht mit einem Widerstand von etwa $70 \Omega\text{m}$ ($10^{-1,85} \frac{\text{S}}{\text{m}}$) an. Das Inversionsergebnis der Phasenverschiebung zeigt ebenfalls eine Schichtgrenze in 10 m Tiefe. Wie bei einem Wechsel von Kiesen im oberen zu Sanden im unteren Bereich zu erwarten, kommt es zu einem Wechsel von kleinen zu großen Phasen (Blaschek, 2006). Die zweite Schicht, welche eine Phasenverschiebung von etwa 7 mrad hat, ist nur stellenweise vorhanden.

Der Grundwasserspiegel lag während der Messung mit einem Elektrodenabstand von 2 m auf 64 m Profillänge in ca. 2 m Tiefe. Auch für die hydraulische Leitfähigkeit zeigen Hördt et al. (2007) einen geschichteten Untergrund. Im Bereich des vollständig gesättigten Bodens bis in ca. 10 m Tiefe wird eine hydraulische Leitfähigkeit $\langle K \rangle_g$ von $10^{-4} - 10^{-2} \frac{\text{m}}{\text{s}}$ und ab 10 m Tiefe Werte von $10^{-5} - 10^{-4} \frac{\text{m}}{\text{s}}$ ermittelt. Diese Werte

sind in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Vereecken et al. (2000). Ein Faktor 10 zwischen horizontaler und vertikaler Korrelationslänge der hydraulischen Leitfähigkeit, welcher ein statistisches Maß zur Wiederholung von Strukturen ist, ist ebenfalls ein deutliches Indiz für eine horizontal geschichtete Untergrundstruktur (Vereecken et al., 2000).

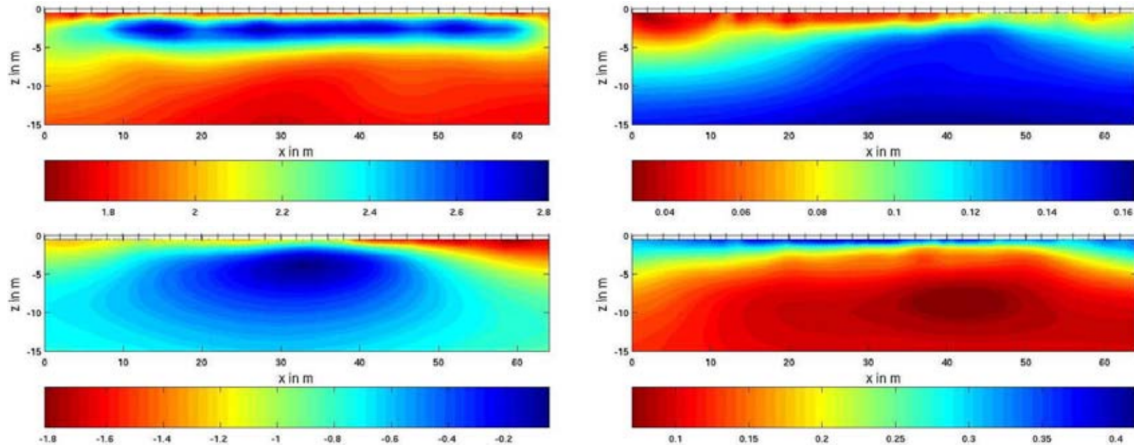


Abbildung 5.8.: Dargestellt ist das 2D Inversionsergebnis der Cole-Cole-Parameter der SIP Messung für alle Frequenzen für Profil 32. Oben, links: ρ_{dc} [\log_{10} , Ωm]. Oben, rechts: m [$\frac{V}{V}$]. Unten, links: τ [\log_{10} , s]. Unten, rechts: c (Blaschek, 2006). Die Lage des Profils 32 stimmt mit Profil 1 in Abbildung 5.4 überein.

Die SIP-Messdaten aus Hördt et al. (2007) wurden ebenfalls von Blaschek (2006) ausgewertet. Eine Anpassung der Cole-Cole-Parameter erfolgte durch eine gemeinsame Inversion aller Frequenzen für Profil 32, welches mit Profil 1 übereinstimmt. Das Inversionsergebnis des Gleichstromwiderstands lässt sich durch einen Drei-Schicht-Fall beschreiben. Einer etwa 1 m mächtigen gut leitenden Schicht mit einem ungefähren Gleichstromwiderstand von $60 \Omega m$ folgt ein schlechter Leiter mit etwa $500 \Omega m$. Die dritte Schicht beginnt in ungefähr 5 m Tiefe und hat einen Widerstand von ca. $80 \Omega m$. Die Aufladbarkeit zeigt einen graduellen Verlauf von kleinen Werten an der Oberfläche bis zu $200 \frac{mV}{V}$ in der Tiefe. Die Relaxationszeit τ nimmt Werte zwischen 0,02 bis 1 s an und zeigt eine ähnliche Struktur wie die Aufladbarkeit. Der Frequenzexponent c , welcher Werte zwischen 0,1 und 0,4 annimmt, zeigt ein gegensätzliches Verhalten Blaschek (2006).

Im Messgebiet ist für den Gleichstromwiderstand ein gut leitender Untergrund, welcher durch eine schlecht leitende Schicht in etwa 1,5 m Tiefe mit einer Mächtigkeit von etwa 2 m unterbrochen wird, zu erwarten. Aufgrund des Fehlens der Tonschicht in einigen Bohrungen sind in einer Tiefenlage von etwa 11 m Unregelmäßigkeiten in der horizontalen Schichtung wahrscheinlich. Die Aussagen über die Verteilung

der polarisierbaren Strukturen im Untergrund sind nicht eindeutig. Es kann eine heterogene polarisierbare Zone in einer ähnlichen Tiefenlage wie der schlechte Leiter auftreten (siehe Abbildung 5.7). Aber auch eine gleichmäßige Verteilung der IP-Parameter im Untergrund, wie in Abbildung 5.8, erscheint möglich.

5.2. Zeitbereichs-IP-Messung in Krauthausen, Jülich in 2012

Der bei der Messung in Krauthausen verwendete Messaufbau und die verwendeten Geräte werden in Kapitel 5.2.1 vorgestellt und erläutert. Mit dem verwendeten Messaufbau wurde eine Testmessung in Köln-Longerich durchgeführt und besonders die Verwendung von Edelstahlelektroden als Potentialelektroden untersucht (siehe Kapitel 5.2.2).

5.2.1. Messaufbau und verwendete Geräte

Das *Terrameter LS* der Firma ABEM, zur Verfügung gestellt von der Universität Lund, besitzt 12 galvanisch getrennte Kanäle und einen leistungsstarken internen Sender (Output Power 250 W, Maximum Output Current 2500 mA, Maximum Output Voltage ± 600 V). Es können ganze Zeitreihen mit einer Auflösung von 1 ms und einer hohen Dynamik (Range ± 600 V, 20M Ω) aufgezeichnet werden. Große Vorteile sind die Möglichkeit einer Multielektroden-Auslage und die Kombination von Sender und Empfänger in einem Gerät, was einen hohen Messfortschritt ermöglicht.

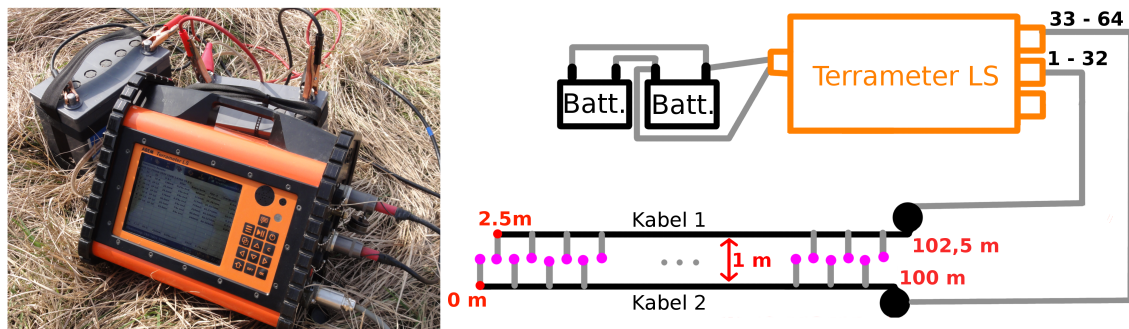


Abbildung 5.9.: Links: Foto des *Terrameter LS* und zweier Autobatterien. Rechts: Der verwendete Messaufbau bestehend aus dem *Terrameter LS*, zwei Autobatterien, zwei Multielektrodenkabeln und 41 Elektroden, welche durch Jumper-Kabel an den Multielektrodenkabeln angeschlossen sind.

Ein Bild des *Terrameter LS* findet sich in Abbildung 5.9 (links). Der verwendete Messaufbau ist skizziert (rechts) und besteht neben dem *Terrameter LS*, welches mit zwei Autobatterien betrieben wird, aus zwei Multielektrodenkabeln mit je 21 Abgriffen und 41 Edelstahlelektroden. Das Messprotokoll ist so aufgebaut, dass Sender- und Empfängerelektroden stets an unterschiedlichen Kabeln angeschlossen sind. Dahlin and Leroux (2012) zeigen anhand verschiedener Feldstudien, dass durch die Nutzung von separaten Kabeln für Strom- und Potentialelektroden eine deutliche Verbesserung der Qualität der gemessenen Transienten erzielt werden kann. Zuerst wurden die an Kabel 1 angeschlossenen Elektroden zur Stromeinspeisung genutzt und die Elektroden von Kabel 2 zur Potentialmessung verwendet. Nachdem die so möglichen Messkonfigurationen der Gradientenauslage vermessen waren, wurde Kabel 2 zur Stromeinspeisung und Kabel 1 zur Potentialmessung genutzt. Ein Auslegen der Kabel in mindestens 1 m Abstand parallel zu einander führt nach Dahlin and Leroux (2012) ebenfalls zu einer deutlichen Verbesserung des Signal-zu-Rausch-Verhältnis. Es wurde beim Erstellen des Messprotokolls, welches die Reihenfolge der Nutzung der Elektroden als Sender- oder Empfängerelektrode bestimmt, zudem auf möglichst lange Zeitintervalle zwischen der Nutzung als Empfängerelektrode nach vorangegangener Nutzung als Senderelektrode geachtet. Das Abklingen von möglichen Aufladevorgängen im Untergrund in unmittelbarer Umgebung der Elektroden, verursacht durch das Einspeisen des Stroms, wird damit vor dem Messen des Potentials ermöglicht (Dahlin et al., 2002).

5.2.2. Testmessungen mit dem *Terrameter LS* in Köln-Longerich

Im März 2012 fand eine Testmessung mit dem *Terrameter LS* in Köln-Longerich mit der Unterstützung von Prof. T. Dahlin (Universität Lund) statt. Auf einer ehemaligen Altlast in Köln-Longerich, dem ersten Messgebiet von Hönig (2002), wurde ein 202,5 m langes Profil mit 82 Elektroden und einem Elektrodenabstand von 2,5 m vermessen. In etwa 100 m Entfernung zum Profil befanden sich östlich eine Autobahn, südlich eine Zugstrecke und im Westen ein Abfallcenter, was zu einem relativ hohen Noiselevel führte.

Für einen Elektrodenvergleich wurden die Messungen in Köln-Longerich mit Edelstahlelektroden und nicht-polarisierbaren Elektroden durchgeführt. In einer ersten Messreihe wurden nur Edelstahlelektroden verwendet und die Ankopplung der Elektroden nur durch Angießen mit Leitungswasser verbessert (siehe Abbildung 5.10 (a)). Für eine zweite Messreihe wurden 10 der Edelstahlelektroden durch nicht-polarisierbare Elektroden ersetzt und diese mithilfe von Bentonit angekoppelt (siehe Abbildung 5.10 (b)). Abschließend wurden die nicht-polarisierbaren Elektroden wieder durch Edelstahlelektroden ersetzt und eine dritte Messreihe durchgeführt, wobei

die zehn ausgetauschten Edelstahl Elektroden mit Bentonit angekoppelt waren.

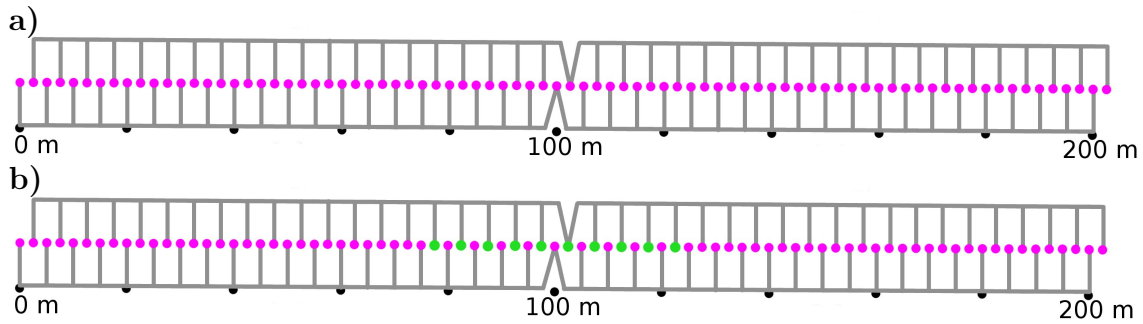


Abbildung 5.10.: a) Verwendete Elektroden für die erste und dritte Messreihe: Edelstahlelektroden (magenta); b) Verwendete Elektroden für die zweite Messreihe: 10 Edelstahlelektroden wurden durch nicht-polarisierbare Elektroden ersetzt und mit Bentonit angekoppelt (grün).

Mit den entsprechenden Elektroden wurden je Messreihe insgesamt 80 Elektrodenkombinationen vermessen. Für 9% der 80 Elektrodenkombinationen waren die Zeitreihen aller drei Messreihen verschieden. Bei 11% der Elektrodenkombinationen unterschieden sich nur die Zeitreihen der ersten Messreihe, welche auch deutlich stärker gestört ist, von den beiden anderen (siehe Abbildung 5.11 (a)). Die Mehrheit der Zeitreihen war für 28% der Elektrodenkombinationen ähnlich und für 52 % der Elektrodenkombinationen nahezu identisch, wie auch in dem Beispiel in Abbildung 5.11 (b) zu erkennen.

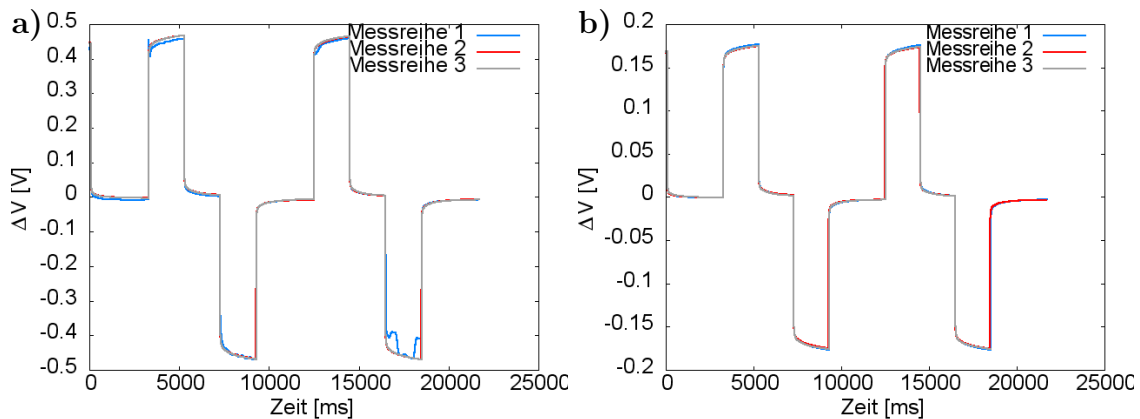


Abbildung 5.11.: a) Beispiel einer Elektrodenkombination für die sich nur die Zeitreihe der ersten Messreihe von denen der anderen unterscheidet; b) Beispiel einer Elektrodenkombination für die alle drei Zeitreihen nahezu identisch sind.

Zwischen der zweiten und dritten Messreihe waren kaum Unterschiede erkennbar. Die Datenqualität ändert sich nicht erkennbar bei einem Austausch der Edelstahlelektroden durch nicht-polarisierbare Elektroden. Deutliche Unterschiede sind jedoch zwischen der ersten und der dritten Messreihe zu erkennen, obwohl beide mit

Edelstahlelektroden durchgeführt wurden. Der einzige Unterschied war die Ankopplung der Empfängerlektroden durch Bentonit in der dritten Messreihe. Eine gute Ankopplung der Elektroden ist somit entscheidend für die erzielte Datenqualität.

Auch Dahlin et al. (2002) zeigen, dass sich für eine erfolgreiche Messung selbst unter schwierigen Bedingungen (hohes Noiselevel, hoher Ankopplungswiderstand) bei separaten Kabeln für Sender- und Empfängerlektroden einfache Edelstahlelektroden eignen. Dies erhöht den Messfortschritt signifikant, da kein Umstecken der Elektroden erfolgen muss. Eine Verbesserung der Datenqualität lässt sich bei einem hohen Übergangswiderstand durch den Einsatz von Bentonit erreichen.

5.2.3. IP-Messung in Krauthausen 2012

Im Oktober 2012 fand eine Messkampagne auf dem Testfeld des Forschungszentrums Jülich in Krauthausen statt. Die Universität Lund stellte hierfür ihr *Terra-meter LS* zur Verfügung. An insgesamt neun Messtagen wurden neun Profile mit der Gradienten-Auslage vermessen, wobei auf den Profilen 1 und 2 jeweils am ersten und letzten Messtag gemessen wurde (siehe Abbildung 2.8). Die Profile lagen in 5 m Abstand zueinander. Insgesamt wurden knapp 21.000 Zeitreihen aufgezeichnet. Die Lage der Profile orientiert sich an vorherigen Messungen und ist Abbildung 5.4 zu entnehmen.

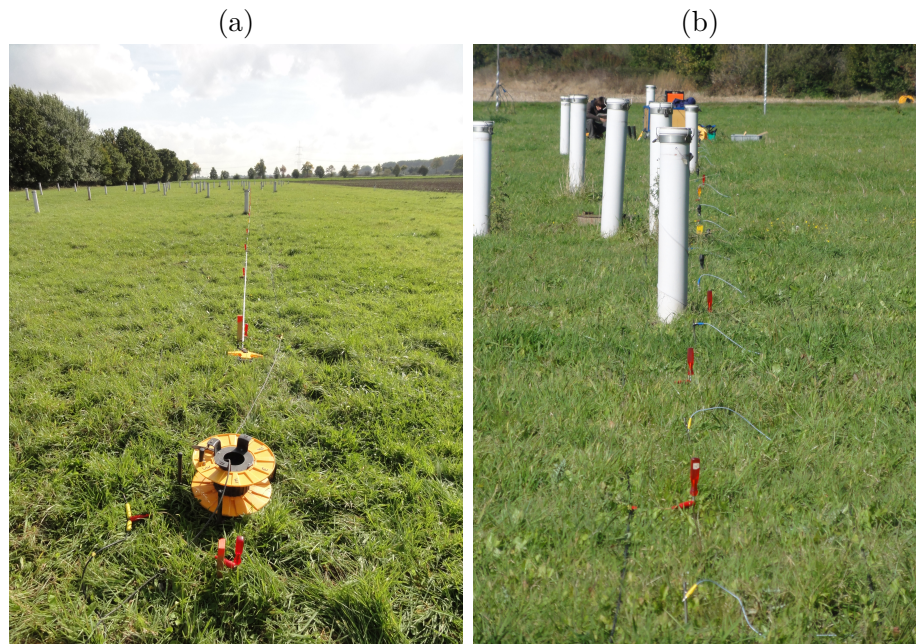


Abbildung 5.12.: (a) Foto des Messgebiets entlang Profil 1 vom Ende in Richtung Profilanfang. (b) Blick entlang des Profils 3 vom Mittelpunkt Richtung Endpunkt. Die Bohrlokalationen sind mit weißen Rohren verschlossen.

Bei einem Elektrodenabstand von 2,5 m und einer Anzahl von 41 Elektroden konnte eine Profillänge von 102,5 m erreicht werden. Es wurde der für die Testmessung in Köln-Longerich beschriebene Messaufbau mit Edelstahlelektroden verwendet.

Das linke Foto in Abbildung 5.12 (a) zeigt einen Blick entlang des ersten Profils und gibt einen guten Überblick über das flache, gleichmäßig bewachsene Testfeld. Man erkennt die Edelstahlelektroden, welche einen roten Griff haben, und im Hintergrund einige Bohrlokationen. Im rechten Foto der Abbildung 5.12 (b) sind einige Bohrlokationen, welche mit weißen Rohren verkleidet und mit Kies aufgefüllt sind, zu erkennen. Das Foto wurde vom Mittelpunkt des dritten Profils in Richtung des Endpunkts aufgenommen.

In der Zeit der Messung war der Boden aufgrund der häufigen Niederschläge gleichmäßig durchfeuchtet und es konnte auch ohne Angießen der Elektroden eine sehr gute Ankopplung erreicht werden. Bei einem der vier verwendeten Multielektrodenkabeln waren zwei Abgriffe defekt, was zu leichten Unregelmäßigkeiten in der Elektrodenverteilung führte (siehe Abbildung 3.2).

5.3. Preprocessing der Messdaten

Die aufgenommenen Zeitreihen mit einer Länge von jeweils 32800 ms enthalten 7 Transienten mit einer Länge zwischen 3900 und 6300 ms. Die aufgenommenen Potentialdifferenzen bestehen aus Ein- und Ausschaltern bei 7 Schaltvorgängen je Sender-Empfänger-Kombination. Die Zeitabstände zwischen den Schaltvorgängen sind ungleichmäßig lang. Die Zeitspanne zwischen dem ersten und dem zweiten sowie zwischen dem fünften und dem sechsten Schaltvorgang ist besonders lang gewählt. Es stehen somit zwei Transienten mit mehr Zeitpunkten zur Verfügung. Zudem soll das vollständige Abklingen des Polarisations-Effekt gewährleistet werden, damit sich keine überlagernden Effekte der Schaltvorgänge aufbauen können.

Zur Vorbereitung der Messdaten für die Inversion, welche hohe Ansprüche an die Datenqualität stellt, wurde im Rahmen dieser Arbeit die Preprocessing-Routine *filtering* in *Fortran 95* entwickelt. Die Ausführung der Preprocessing-Routine wird in Kapitel 5.3.1 erläutert und die einzelnen Schritte werden in Kapitel 5.3.2, am Beispiel einer stark verrauschten Zeitreihe, erklärt. Als Vorlage für das grundsätzliche Vorgehen bei der Analyse und Verarbeitung der Daten diene das, an der Universität zu Köln entwickelte, Program *Segy.Pro* zur Verarbeitung von Long-Offset-Transient-Electromagnetik (LOTEM) Daten (Helwig, 2000; Scholl, 2001).

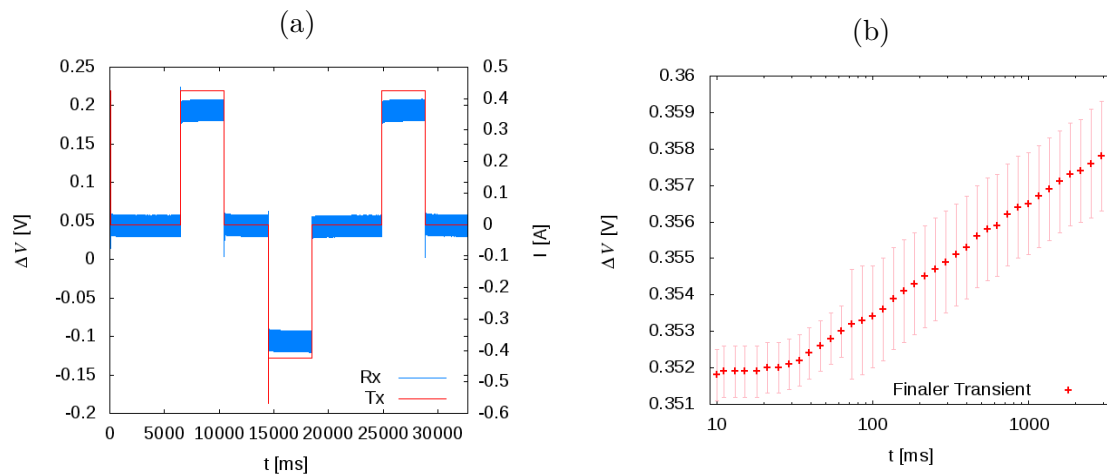


Abbildung 5.13.: (a) Gemessene, unbearbeitete Zeitreihe der 1279. Sender-Empfänger-Kombination $\Delta V(t)$, welche sieben Transienten enthält, (blau) und die Stromfunktion $I(t)$ (rot). (b) Der prozessierte Einschalt-Transient der 1279. Sender-Empfänger-Kombination in logarithmisch-äquidistanten Zeitabständen mit der Standardabweichung der einzelnen Zeitpunkte.

In Abbildung 5.13 (a) ist beispielhaft die aufgezeichnete Zeitreihe der 1279. Sender-Empfänger-Kombination $\Delta V(t)$, bestehend aus 7 Transienten, in blau dargestellt. Die zugehörige Stromfunktion $I(t)$ ist in rot eingezeichnet. Es wurde zur

Verdeutlichung des Preprocessings eine stark verrauschte und gestörte Zeitreihe ausgewählt. Sie gehört zu den Zeitreihen mit dem höchstem Rauschlevel der gesamten Messung. Der prozessierte Transient der 1279. Sender-Empfänger-Kombination ist für Zeitpunkte mit logarithmisch-äquidistantem Abstand in Abbildung 5.13 (b) dargestellt. Die Nutzung logarithmisch-äquidistanter Zeitwerte führt zu einer akzeptablen Rechenzeit der Inversion und gewährleistet gleichzeitig ein feines Abtasten des Anstiegs des Transienten zu frühen Zeiten. Die Zeitabstände werden für den wenig dynamischen Verlauf des Transienten zu späten Zeiten größer.

5.3.1. Ausführung der Preprocessing-Routine *filtering*

Die entwickelte Preprocessing-Routine *filtering* wird über die freie *Unix*-Shell *Bash* (*Bourne-Again Shell*) gesteuert. Zu Beginn wird das Shellsript *filtering_bash.sh* aufgerufen, welches die vorhandenen Sender im aktuellen Verzeichnis ausgibt. Per Shell-Eingabe wird ein Sender ausgewählt und das Shellsript ruft das *Fortran 95* Programm *filtering_program.f95* auf. Die Zeitreihe $\Delta V(t)$ des ersten Empfängers des ausgewählten Senders wird mittels *gnuplot*, einem kommandozeilengesteuerten Computerprogramms zur graphischen Darstellung von Messdaten, dargestellt und mittels des Bildbetrachters *eog* (*Eye of GNOME*) automatisch angezeigt. Der Anwender wählt nun per Shell-Eingabe aus, ob er die dargestellte Zeitreihe $\Delta V(t)$ verwenden möchte.

Soll die Zeitreihe $\Delta V(t)$ genutzt werden, wird diese vom Programm *filtering_program.f95* auf den Strom I normiert und Ausreißer werden entfernt. Die Zeitreihe $\Delta V(t)$ wird gefiltert und ein möglicher Trend wird abgezogen. Die bearbeitete Zeitreihe wird für jeden Zwischenschritt mit *gnuplot* dargestellt, aber dem Anwender nicht automatisch angezeigt. Die gelevelte Zeitreihe wird in die einzelnen Transienten (Einzel-Transient) zerschnitten. Die Einzel-Transienten der Zeitreihe werden mit *gnuplot* dargestellt, und die erzeugte Abbildung mit *eog* angezeigt. Per Shell-Eingabe wird der Anwender aufgefordert die Einzel-Transienten auszuwählen, die zum Stapeln genutzt werden sollen. Der gestapelte Transient mit berechneter Standardabweichung und die Einzel-Transienten werden mit *gnuplot* dargestellt, und die erzeugte Abbildung mit *eog* angezeigt. Der Anwender wird aufgefordert den gestapelten Transienten zu beurteilen. Der Schritt des Stapelns kann wiederholt werden, entspricht der gestapelte Transient nicht den Ansprüchen des Anwenders. Genügt der gestapelte Transient $\Delta V(t)$ den Anforderungen, wird er für äquidistante Zeitpunkte als Input-File für die Inversion mit *IP3DInv_{DC}* gespeichert, und mit *gnuplot* dargestellt.

Es wird automatisch der nächste Empfänger des Senders als nächste zu bearbeitende Zeitreihe $\Delta V(t)$ vorgeschlagen, bis kein weiterer Empfänger mehr zur Verfügung

steht. Mit dem Anzeigen aller verfügbaren Sendernummern beginnt das beschriebene Preprocessing für den nächsten Sender von vorne.

5.3.2. Einzelne Schritte des Preprocessings

Die einzelnen Schritte der Preprocessing-Routine *filtering* werden im Folgenden beispielhaft an der Zeitreihe $\Delta V(t)$ der 1279. Sender-Empfänger-Kombination erläutert.

Normierung der Zeitreihe auf den Strom: Im ersten Schritt wird die Zeitreihe $\Delta V(t)$ auf die verwendete Stromstärke normiert, dies ist nötig da der Inversionsalgorithmus *IP3DInv* von einer Stromstärke von 1 A ausgeht. Dabei wird der vom *Terrameter LS* ausgegebene Wert für die Stromstärke I_{abs} für jeden Zeitpunkt t verwendet, und tatsächliche Schwankungen der Stromstärke I über die Zeit gehen nicht ein

$$\Delta V(t) = \frac{\Delta V(t)}{I_{abs}}. \quad (5.1)$$

Das sehr stabile Verhalten der Stromfunktion $I(t)$, außer für sehr wenige Zeitpunkte t , rechtfertigt ein solches Vorgehen (siehe auch Abbildung 5.13 (a)). Die auf die Stromstärke I_{abs} normierte Zeitreihe $\Delta V(t)$ ist in Abbildung 5.14 (a) in rot und die unbearbeitete Zeitreihe $\Delta V(t)$ zum Vergleich in blau dargestellt. In den folgenden Abbildungen ist die Zeitreihe des vorherigen Schritts stets in blau und die des aktuellen Schritts in rot eingezeichnet. Deutliche Ausreißer, welche meist im Bereich des Ein- bzw. Ausschaltens des Stroms liegen, werden automatisch detektiert und entfernt.

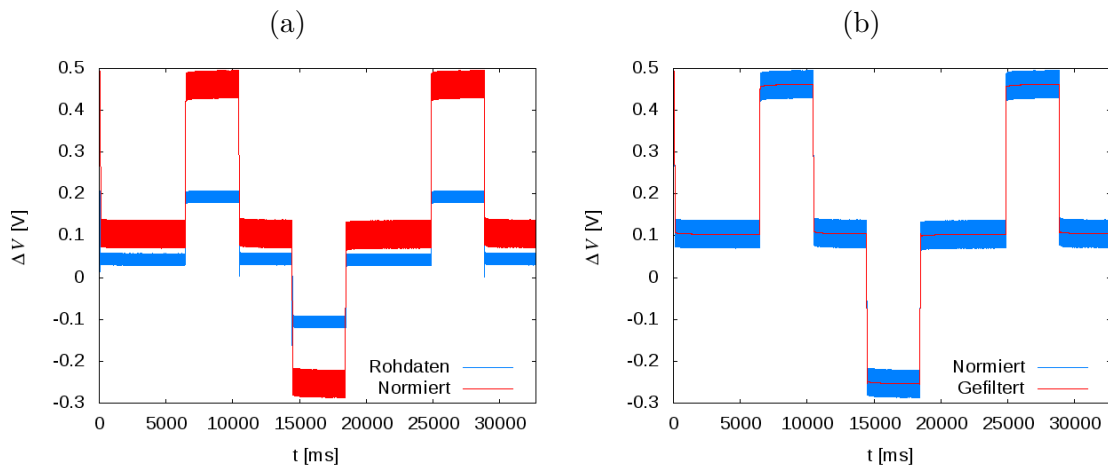


Abbildung 5.14.: (a) Gemessene, unbearbeitete Zeitreihe der 1279. Sender-Empfänger-Kombination $\Delta V(t)$, welche sieben Transienten enthält, (blau) und die auf die Stromstärke normierte Zeitreihe $\Delta V(t)$ (rot). (b) Gefilterte Zeitreihe der 1279. Sender-Empfänger-Kombination $\Delta V(t)$ in rot und normierte Zeitreihe $\Delta V(t)$ in blau.

Filtern der Zeitreihe: Anschließend wird die Zeitreihe gefiltert. Die Hauptstörfrequenzen im Messgebiet waren $16\frac{2}{3}$ Hz (Oberleitungsnetz der Eisenbahn) und 50 Hz (öffentliches Stromnetz). Der verwendete Filter für die Zeitpunkte nach dem Schaltvorgang kann vereinfacht beschrieben werden über:

$$\Delta V(t) = \begin{cases} \frac{1}{n} \cdot \sum_{k=-(n-1)/2}^{(n-1)/2} \Delta V(t-k) & \text{für } (n + (n+1)/2) < t < (T_{f1} + 1 + n) \\ \frac{(\Delta V(t) + \Delta V(t-T_{f1})) + (\Delta V(t) + \Delta V(t+T_{f1}))}{2} & \text{für } (T_{f1} + n) < t < (T_{f2} + 1 + n) \\ \frac{(\Delta V(t) + \Delta V(t-T_{f2})) + (\Delta V(t) + \Delta V(t+T_{f2}))}{2} & \text{für } (T_{f2} + n) < t. \end{cases} \quad (5.2)$$

Die ersten n Zeitpunkte, direkt nach dem Schaltvorgang, werden nicht gefiltert und auch nicht zum Filtern der anderen Zeitpunkte genutzt, da sie meist stark gestört sind. Die halben Perioden T_{f1} und T_{f2} werden über die sinusförmigen Störfrequenzen $f1$ und $f2$, welche aus der Zeitreihe entfernt werden sollen, definiert. Die größere Frequenz entspricht dabei stets $f1$, in diesem Fall 50 Hz was einer halben Periode $T_{f1} = 20/2$ ms entspricht, und kennzeichnet den Übergang von Fall 1 zu 2. Für die Zeitpunkte im ersten Fall in Gleichung (5.2) wird die Zeitreihe über einen gleitenden Mittelwert geglättet. Durch die Addition der Potentialdifferenzen $\Delta V(t)$ und $\Delta V(t+T_{f1})$, welche um eine halbe Periode versetzt bei späteren Zeiten liegt, wird die Störfrequenz entfernt. Allerdings kommt es auch zu einer Verschiebung der Zeitreihe in positiver t -Richtung. Um dies zu Verhindern wird auch $\Delta V(t-T_{f1})$, welches eine halbe Periode versetzt bei früheren Zeiten liegt, genutzt. Durch die Bildung eines Mittelwerts beider Summen, wird die Verschiebung in t Richtung aufgehoben. Da die halbe Periode der Frequenz $16\frac{2}{3}$ Hz mit 30 ms ein ungerades Vielfaches der von 50 Hz ist, kann ab $T_{f2} + n$ Fall 3 für beide Störsignale genutzt werden. Der implementierte Filter macht auch für den Bereich vor dem nächsten Schaltvorgang Fallunterscheidungen, welche analog definiert sind.

Abbildung 5.14 (b) zeigt die gefilterte Zeitreihe in rot und die normierte Zeitreihe in blau. Besonders im Bereich von Ein- bzw. Ausschaltern stark verrauschter Transienten kann es zu Problemen beim Filtern kommen, welche zu einer Verformung der Transienten im Bereich der Schaltzeiten führen.

Abziehen eines möglichen Trends und Leveln der Zeitreihe: Die Zeitreihen können zudem durch sehr niederfrequenten Noise überlagert sein. Dieser lässt sich in erster Näherung durch das Abziehen eines linearen Trends entfernen (Dahlin et al., 2002). Zum Berechnen des linearen Trends werden der erste und der fünfte Transient, bei denen es sich um Auschalter mit einer langen Abklingzeit handelt, genutzt. An die Potentialdifferenzen $\Delta V_1(6000 \text{ ms})$ und $\Delta V_5(6000 \text{ ms})$ wird eine Ge-

rade $y(t)$ angepasst und diese von der gesamten Zeitreihe $\Delta V(t)$ für jeden Zeitpunkt t abgezogen:

$$\Delta V(t) = \Delta V(t) - y(t) \quad (5.3)$$

Im gleichen Schritt wird ein möglicher Shift der gesamten Zeitreihe entfernt. Die gelevelte Zeitreihe ist in Abbildung 5.15 (a) in rot eingezeichnet.

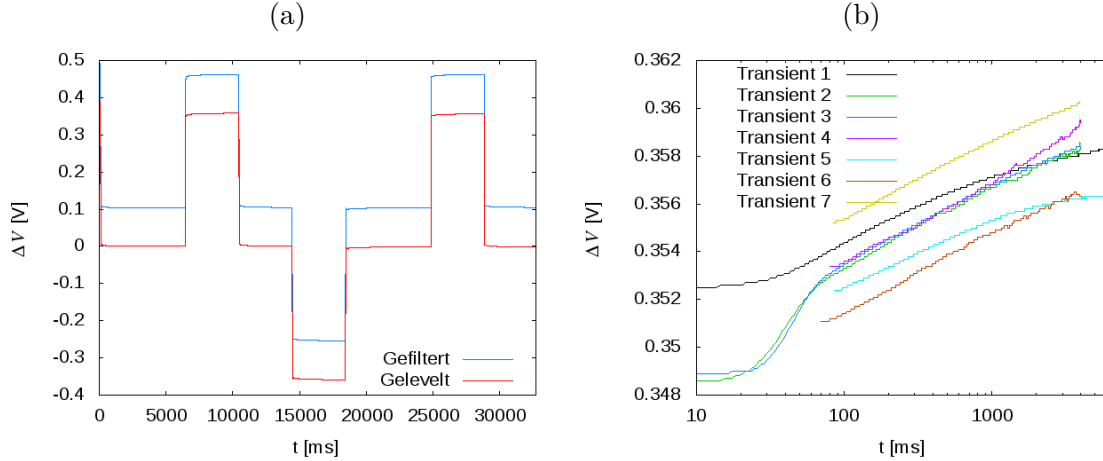


Abbildung 5.15.: (a) Gefilterte Zeitreihe $\Delta V(t)$ (blau) und die gelevelte Zeitreihe $\Delta V(t)$ (rot). (b) Sieben Einzel-Transienten der Zeitreihe nach dem Zerschneiden der Zeitreihe $\Delta V(t)$.

Zerschneiden der Zeitreihe: Im vierten Schritt wird die Zeitreihe zerschnitten. Die Schnittpunkte werden entsprechend der Zeitpunkte des Ein- bzw. Ausschaltens des Stroms entsprechend der aufgezeichneten Stromfunktion gewählt. In diesem Schritt werden Bereiche des Transienten entfernt, welche durch das Filtern des Transienten stark verformt wurden und einen nahezu konstanten Wert haben. Im gezeigten Beispiel ist dies für die Transienten 5-7 bis etwa 80 ms der Fall. Bereiche der Transient 2 und 3, welche ebenfalls verformt sind, werden nicht automatisch entfernt, da weiterhin ein fallender Verlauf zu erkennen ist. Ihre Entfernung kann im Rahmen des Preprocessings aber durch eine entsprechende Shell-Eingabe erfolgen. Die Einzel-Transienten werden entsprechend der Stromfunktion gespiegelt und verschoben, so dass aus allen Ein- und Ausschaltvorgängen ein Einschalter berechnet werden kann.

Stapeln der Einzel-Transienten und Berechnen der Standardabweichung: Die Einzel-Transienten $\Delta V_n(t)$, welche fürs Stapeln genutzt werden sollen, werden manuell ausgewählt und das arithmetische Mittel für m Transienten über

$$\Delta V(t) = \frac{1}{m} \sum_{n=1}^m \Delta V_n(t). \quad (5.4)$$

berechnet. Die Berechnung der Standardabweichung ϵ erfolgt über:

$$\epsilon(t) = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{n=1}^m (\Delta V_n(t) - \Delta V(t))^2}. \quad (5.5)$$

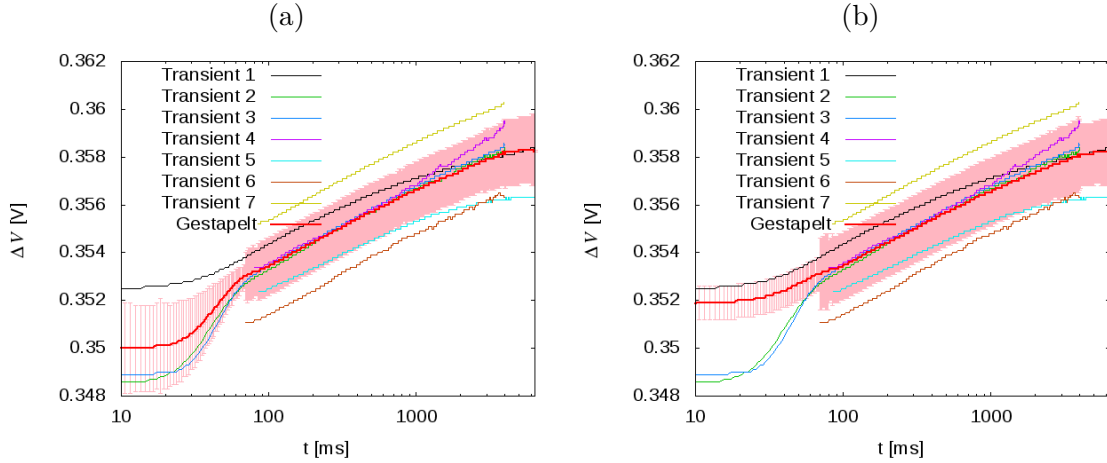


Abbildung 5.16.: Gestapelter Transient $\Delta V(t)$ (rot, fett) und die berechnete Standardabweichung (hellrot) aller Zeitpunkte bei (a) der Verwendung aller sieben Einzel-Transienten $\Delta V_n(t)$ und bei (b) der Verwendung der Einzel-Transienten $\Delta V_n(t)$ 1 und 4-7. Die Einzel-Transienten $\Delta V_n(t)$ sind als dünne Linien eingezeichnet.

In Abbildung 5.16 (a) ist der resultierende gestapelte Transient $\Delta V(t)$ bei Nutzung aller Transienten der Zeitreihe in rot eingezeichnet. Die berechnete Standardabweichung ist in hellrot dargestellt. Man erkennt einen untypischen Verlauf des Transienten im Bereich bis etwa 80 ms, welcher den verformten Transienten 2 und 3 folgt. In Abbildung 5.16 (b) ist der gestapelte Transient unter Ausschluss von Transient 2 und 3 bei der Stapelung dargestellt. Der Verlauf des Transienten zeigt einen gleichmäßigen, realistischen Verlauf.

Der erste Zeitpunkt, welcher bei Vernachlässigung der EM-Effekte genutzt werden kann, wird entsprechend Gleichung (2.15) abgeschätzt. Bei einer maximalen Auslagenlänge von 80 m und einem Gleichstromwiderstand von 120 Ωm ergibt sich für den größten noch beeinflussten Zeitpunkt t :

$$t [\text{s}] < 0,008 \approx \frac{2\pi(80 [\text{m}])^2}{4 \cdot 10^4 \cdot 120 [\Omega\text{m}]} \quad (5.6)$$

Es kann somit angenommen werden, dass ab 10 ms die EM-Effekte vernachlässigt werden können. Die verwendeten Transienten umfassen somit 39 Zeitpunkte, welche in logarithmisch-äquidistanten Abständen von 10 ms bis 3414 ms gehen und 2,5 Dekaden umfassen.

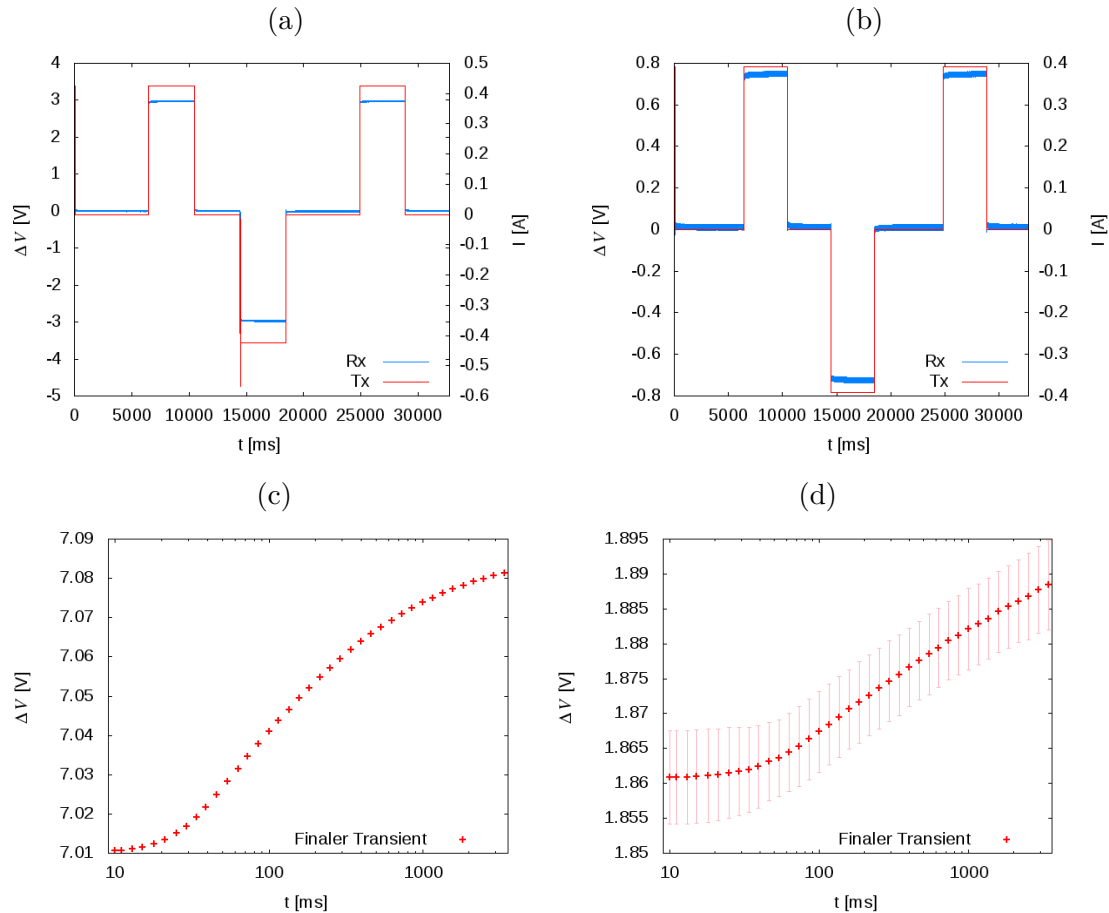


Abbildung 5.17.: Gemessene unbearbeitete Zeitreihe $\Delta V(t)$ (blau) und Stromfunktion $I(t)$ (rot) für (a) die 33. Sender-Empfänger-Kombination und (b) die 147. Sender-Empfänger-Kombination. Prozessierter Transient $\Delta V(t)$ (rot) und die berechnete Standardabweichung (hellrot) aller Zeitpunkte für (c) die 33. Sender-Empfänger-Kombination und für (d) die 147. Sender-Empfänger-Kombination.

Die Qualität der so erhaltenen Transienten ist, trotz des teilweise hohen Noiselevels, sehr gut und genügt den Ansprüchen des Inversionsprogramms. Die Standardabweichung trägt zu einer Gewichtung der Daten, entsprechend des Rauschlevels der Zeitreihe, bei. In Abbildung 5.17 sind zwei weitere Beispiele prozessierter Transienten abgebildet. Der in (c) abgebildete Transient, einer wenig verrauschten Zeitreihe in (a), hat zu vernachlässigende Standardabweichungen, und zeigt einen mit synthetisch berechneten Transienten vergleichbaren Verlauf. In (d) ist der Transient einer durchschnittlich verrauschten Zeitreihe (b) abgebildet. Die Standardabweichungen sind größer, aber der Verlauf ist mit dem in (a) vergleichbar.

Pseudosektion zum ersten Überblick: Als erste Übersicht über die Qualität der aufgenommenen Daten kann die Pseudosektion jedes Profils für den letzten Zeitpunkt betrachtet werden. Aus den Potentialdifferenzen $\Delta V(t)$ des letzten Zeitpunkts wird, nach Gleichung (3.38) unter Berücksichtigung des jeweiligen Geometriefaktors, der scheinbare Widerstand $\rho_a(t)$ des letzten Zeitpunkts berechnet. In Abbildung 5.18 ist beispielhaft die Pseudosektion von Profil 8 als eine Schrägansicht dargestellt. Bei der Darstellung wurde wie in Abbildung 2.12 skizziert vorgegangen, so dass es zu Überlagerungen der Punkte kommt. Für einen ersten Überblick und zum Editieren von deutlichen Ausreißern eignet sich die Darstellungsweise gut. Durch die gekippte Darstellung können alle Punkte gleichzeitig erfasst werden. Die verwendete Gradientenauslage führt in der Darstellung zu nur wenigen ungefähren Tiefenlagen mit einer großen Überdeckung der Punkte und es wird keine ungefähre Struktur des Untergrundes abgebildet.

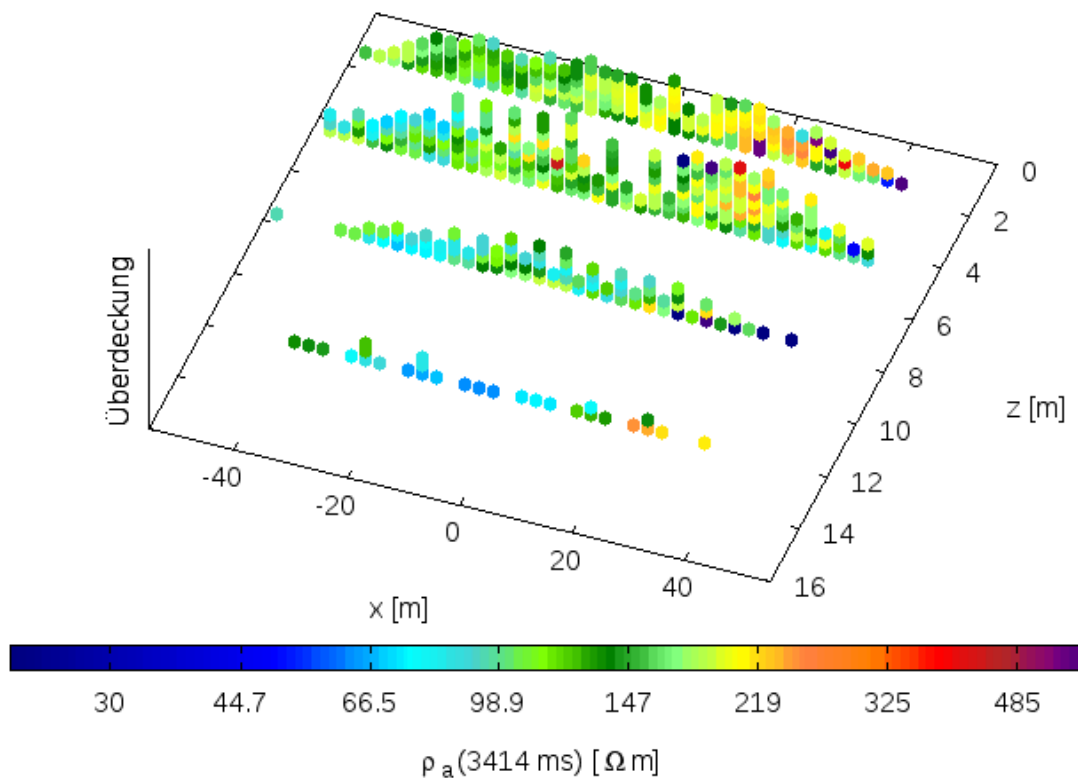


Abbildung 5.18.: Gekippte Ansicht der ρ_a -Pseudosektion des Profils 8 für alle scheinbaren Widerstände des letzten Zeitpunkts 3414 ms aller verwendeten Sender-Empfänger-Kombinationen.

5.4. Inversion der Felddaten mit *IP3DInv*

Bei der Inversion der Felddaten wird analog zu der Inversion synthetischer Daten in Kapitel 4.4 vorgegangen. Im ersten Schritt werden in Kapitel 5.4.1 die Regularisierungsparameter λ , β und γ gewählt. Es wird das L-Curve-Verfahren angewendet und es findet eine visuelle Beurteilung der Inversionsergebnisse mit verschiedenen Parametern statt. Die Inversion des letzten Zeitpunkts wurde mit verschiedenen Startmodellen durchgeführt. Stellvertretend werden die Inversionsergebnisse zweier gegensätzlicher Startmodelle in Kapitel 5.4.2 verglichen. Das beste Modell des letzten Zeitpunkts wird als Startmodell für die Inversion aller Zeitpunkte verwendet (siehe Kapitel 5.4.3). Die Verteilung des zeitabhängigen Widerstands und die Differenz der Modelle des ersten und des letzten Zeitpunkts werden vorgestellt. Die Ergebnisse der Inversion nach den IP-Parametern sind in Kapitel 5.4.4 dargestellt. Für die Profile 1 und 2 wird die Verteilung des Gleichstromwiderstands, der Aufladbarkeit, der Relaxationszeit und des Frequenzexponenten genauer beschrieben.

5.4.1. Wahl der Regularisierungsparameter

Die Inversion mit *IP3DInv_{DC}* kann nach Gleichung (4.15) und Gleichung (4.18) über drei Regularisierungsparameter gesteuert werden. Besonders bei der Inversion von Messdaten ist die Wahl der Parameter entscheidend für das Erreichen eines kleinen Fehlers und einer guten Anpassung der Daten.

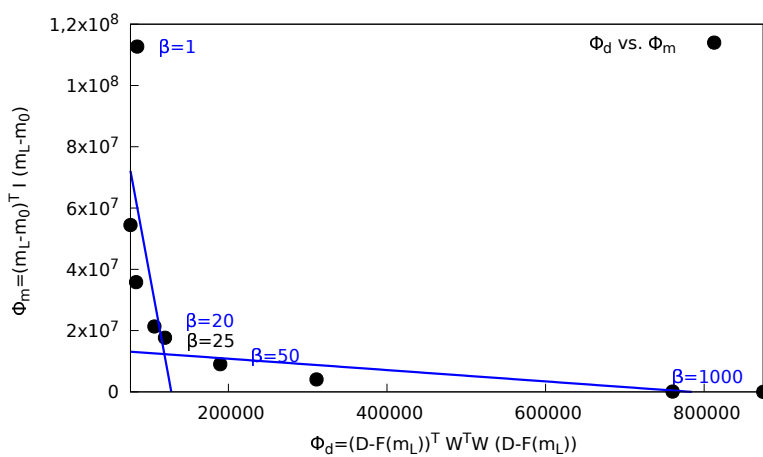


Abbildung 5.19.: Dargestellt als Punkte sind der Term Φ_m , welcher die Ähnlichkeit zum Startmodell belohnt, gegen den Term der Datenanpassung Φ_d für die vierte Iteration der Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern β , welche mit zwei Geraden angepasst wurden.

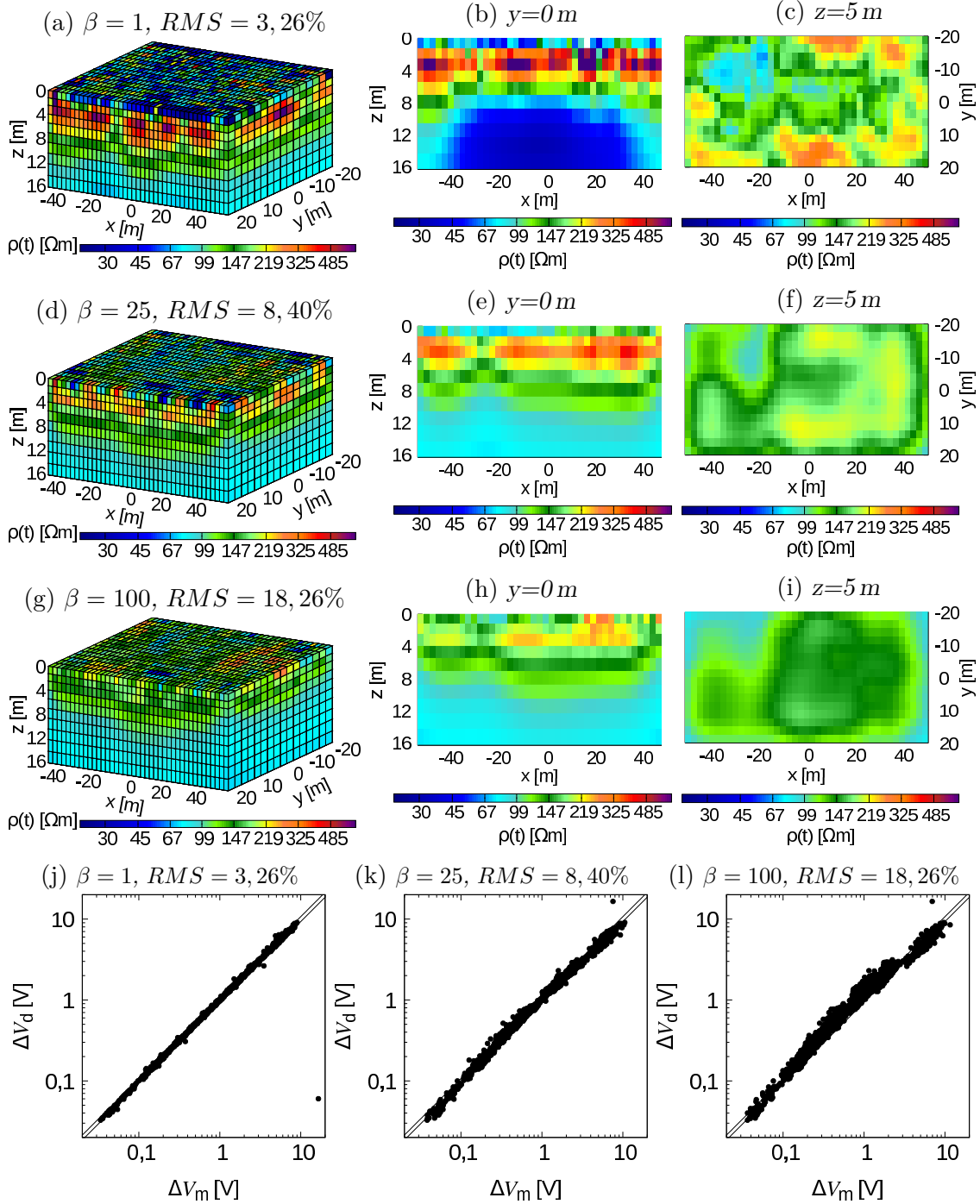


Abbildung 5.20.: (a-i) Dargestellt ist der zeitabhängige Widerstand $\rho(t)$ für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms für Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern β . In der ersten Zeile ist das Ergebnis für $\beta = 1$, in der zweiten für $\beta = 25$ und in der dritten für $\beta = 100$ dargestellt. In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. (j-l) QQ-Plot der Inversion des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Regularisierungsparametern β .

Wahl von β mit $\lambda=0,001$ und L_2 -Norm

Für die Wahl des Regularisierungsparameters β , welcher zur Stabilisierung des Gleichungssystems dient, wurde die L_2 -Norm gewählt, so dass der Regularisierungsparameter γ entfällt. Der Regularisierungsparameter λ wurde mit 0,001 auf einen sehr kleinen Wert gesetzt. Der Einfluss der Glättungsmatrix \mathbf{G} kann bei den Inversionen zum Erstellen der L-Curve in Abbildung 5.19 zur Wahl von β somit vernachlässigt werden. Als Startmodell wurde ein homogener Halbraum mit $70 \Omega\text{m}$ gewählt, so dass Werte des zeitabhängigen Widerstands nahe $70 \Omega\text{m}$ belohnt werden. Die Datenanpassung verbessert sich mit sinkendem β stetig bis die Stabilisierung des Gleichungssystems bei $\beta = 0,1$ zu gering wird und die Inversion bereits für die erste Iteration kein Model-Update findet. Die Ähnlichkeit des Modells zum Startmodell wird mit zunehmendem β immer größer bis für $\beta = 100000$ erneut kein Modell-Update gefunden wird.

Die Wahl von $\beta = 25$, welches nahe des Kreuzungspunkts der beiden Geraden liegt, wird durch die visuelle Beurteilung der Inversionsergebnisse der vierten Iteration bestätigt. Für $\beta = 1, 25$ und 100 sind die Inversionsergebnisse in Abbildung 5.20 dargestellt. Die Verbesserung der Datenanpassung ist deutlich in den QQ-Plots (j-1) zu erkennen. Die damit einhergehende Entstehung von sehr kleinräumigen Strukturen ist in (a-c) zu erkennen. Schon für ein $\beta = 100$ werden die Strukturen im Untergrund stark verschmiert und das Startmodell bleibt in großen Teilen des Modellraums vorhanden.

Wahl von λ mit $\beta=0,001$ und L_2 -Norm

Für die Erstellung der L-Curve des Regularisierungsparameters λ in Abbildung 5.22 wurde ebenfalls die L_2 -Norm gewählt. Der Regularisierungsparameter β wurde gleich 0,001 gesetzt, so dass sein Einfluss vernachlässigt werden kann. Als Startmodell wurde ein homogener Halbraum mit $70 \Omega\text{m}$ gewählt. Auch diese L-Curve zeigt den erwarteten Verlauf, wobei der Bereich möglicher λ zwischen 0,1 und 10000 kleiner ist als der für β .

Die Inversionen werden teilweise schon früh abgebrochen, da kein Modell-Update, welches zu einer Verbesserung des Fehlers führt, gefunden wird. In Abbildung 5.21 sind die Inversionsergebnisse der dritten Iteration dargestellt, welche deutlich größere prozentuale Fehler aufweisen als die der vierten Iteration, welche mit denen aus Abbildung 5.20 vergleichbar sind. Es konnte jedoch nur für λ zwischen 5 und 100 eine vierte Iteration durchgeführt werden.

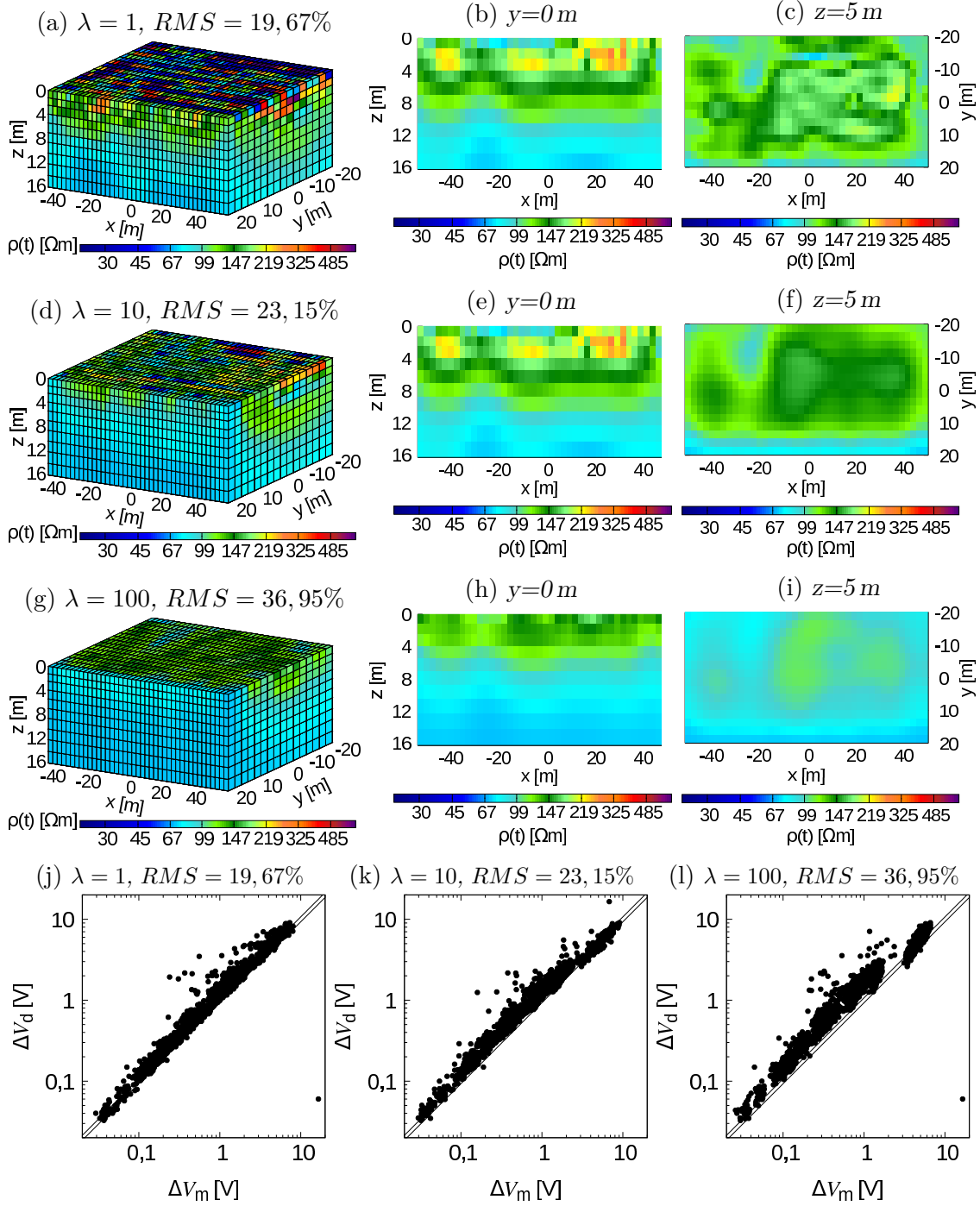


Abbildung 5.21.: (a-i) Dargestellt ist der zeitabhängige Widerstand $\rho(t)$ für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms für Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ . In der ersten Zeile ist das Ergebnis für $\lambda = 1$, in der zweiten für $\lambda = 10$ und in der dritten für $\lambda = 100$ dargestellt. In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. (j-l) QQ-Plot der Inversion des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ .

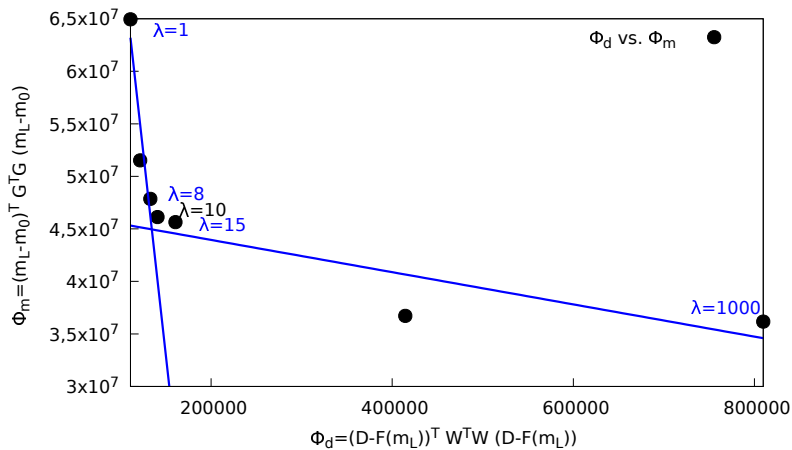


Abbildung 5.22.: Dargestellt als Punkte sind der Glättungsterm Φ_m gegen den Term der Datenanpassung Φ_d für die dritte Iteration der Inversionen verschiedener Regularisierungsparameter λ , welche mit zwei Geraden angepasst wurden.

Die QQ-Plots (j-1) zeigen die Verbesserung der Datenanpassung mit Verkleinerung des Regularisierungsparameter λ , wobei die schlechtere Anpassung gegenüber der vierten Iteration in Abbildung 5.20 deutlich zu erkennen ist.

Auch bei einem fast gleichen *RMS* von ca. 19% lassen sich Unterschiede zwischen den Inversionsergebnissen für $\beta = 100$ in Abbildung 5.20 (g) und für $\lambda = 1$ in Abbildung 5.21 (a) erkennen. Besonders in den ersten Metern treten bei der Inversion für $\lambda = 1$ starke Variationen in der Verteilung des zeitabhängigen Widerstands auf. Im Gegensatz dazu zeigt das Modell für $\beta = 100$ eine gleichmäßigere Verteilung auch in den ersten Metern.

Wahl von γ mit $\beta=25$, $\lambda=10$ und msg-Norm

Bei gegebenen Messdaten, $\beta = 25$, $\lambda = 10$, einem homogenen Halbraum mit $70 \Omega\text{m}$ als Startmodell und der *msg*-Norm scheint γ keinen großen Einfluss auf die Inversion zu haben. Aufgrund der geringen Unterschiede der Inversionsergebnisse der 3. Iteration für $\gamma=1$ und 1000, welche in Abbildung 5.23 dargestellt sind, wurde auf die Durchführung des L-Curve-Verfahrens verzichtet und der Regularisierungsparameter γ auf einen mittleren Wert von 10 gesetzt.

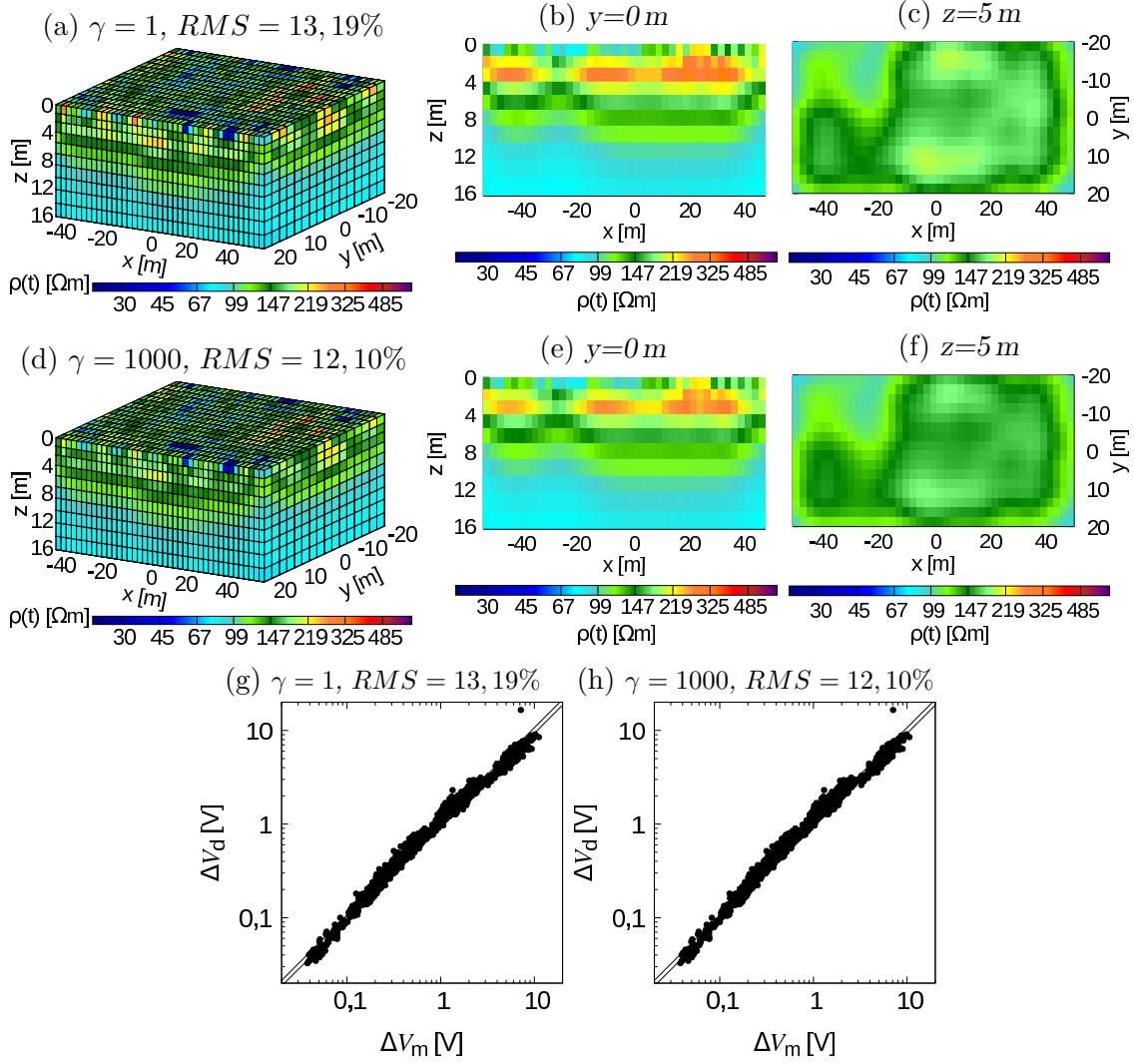


Abbildung 5.23.: (a-f) Dargestellt ist der zeitabhängige Widerstand $\rho(t)$ für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms für Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern γ . In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0 m$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5 m$. (g-h) QQ-Plot der Inversion des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Regularisierungsparametern γ .

5.4.2. Inversion des letzten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Startmodellen

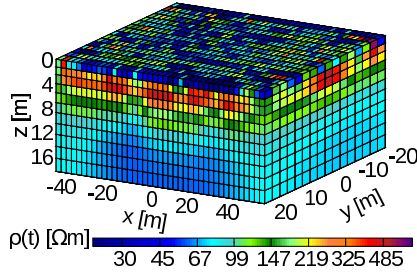
Mit den oben ermittelten Regularisierungsparametern $\beta=25$, $\lambda=10$ und $\gamma=10$ wurden für den zeitabhängigen Widerstand des letzten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Startmodellen DC-Inversionen mit $IP3DInv_{DC}$ durchgeführt. Stellvertretend werden die Inversionsergebnisse zweier gegensätzlicher und extremer Startmodelle vorgestellt. Die Verteilung des zeitabhängigen Widerstands der 19. Iteration der Inversion mit einem homogenen Halbraum mit $80 \Omega\text{m}$ als Startmodell ist in Abbildung 5.24 (a-c) dargestellt. Aus den in Kapitel 5.1.2 vorgestellten Inversionsergebnissen früherer Messungen, welche in Tabelle 5.1 zusammengestellt sind, wurde ein a priori Modell erstellt, welches sich ebenfalls in der Tabelle findet. Das Inversionsergebnis der Verteilung des zeitabhängigen Widerstands der 19. Iteration mit dem a priori Modell als Startmodell findet sich in Abbildung 5.24 (d-f). Die

Tabelle 5.1.: Verteilung des Widerstands ρ in den Modellen aus Gößling (2004), Nix (2005), Hördt et al. (2007) und Blaschek (2006). Die Oberkante der Schicht s wird mit d_s [m] und der Widerstand der Schicht mit ρ_s [Ωm] bezeichnet.

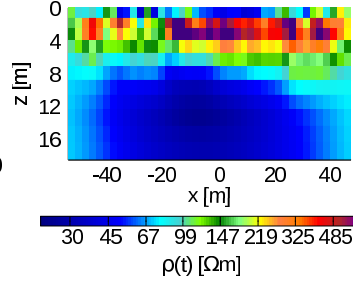
	d_1	ρ_1	d_2	ρ_2	d_3	ρ_3	d_4	ρ_4
Gößling (2004)	0	60	1	400	3	60		
Nix (2005)	0	40	2	>120	6	25		
Hördt et al. (2007)	0	100	1,5	560	3	140	10	70
Blaschek (2006)	0	60	1	500	5	80		
a priori Modell	0	80	1,25	400	4	125	10,6	50

Verteilung des zeitabhängigen Widerstands beider Inversionen zeigt eine ähnliche Struktur bei einem RMS von etwa 8% und einem χ^2 von ca. 0,04. Unabhängig von der Wahl des Startmodells bildet sich ein Schichtmodell aus, welches für die ersten beiden Schichten sowohl in Mächtigkeit als auch zeitabhängigem Widerstand sehr gut übereinstimmt. Auch eine Unterbrechung der zweiten Schicht findet sich in beiden Modellen zwischen -31,25 m und -18,75 m, wobei diese in dem Ergebnis der Inversion mit dem a priori Modell deutlicher ausgeprägt ist. In beiden Fällen folgt als dritte Schicht wieder ein guter Leiter, welcher sich jedoch im zeitabhängigen Widerstand unterscheidet. Das Auftreten von Strukturen unabhängig vom Startmodell ist ein starkes Zeichen, dass die Ursache des Auftretens in den Messdaten und nicht in der Wahl der Regularisierungsparameter liegt. Auch die Verteilung der Coverage ist für beide Inversionen sehr ähnlich, und es lassen sich visuell kaum Unterschiede feststellen. Bis in eine Tiefe von etwa 16 m kann man von der Bestimmung der Inversionsergebnisse durch die Messdaten ausgehen.

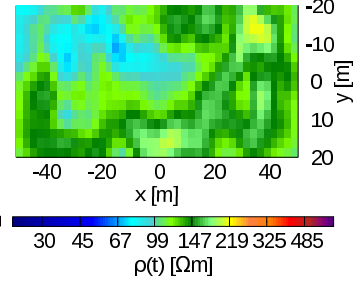
(a) Iteration=19, 80 Ωm Halb-
raum, $RMS = 8,4\%$, $\chi^2 = 0,05$



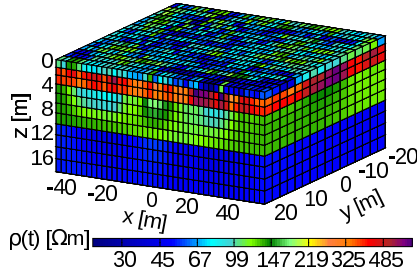
(b) $y=-10\text{ m}$



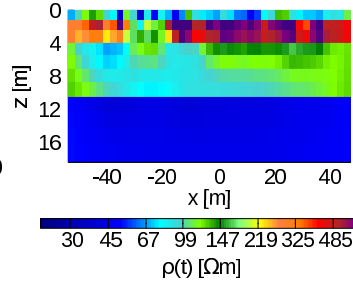
(c) $z=5\text{ m}$



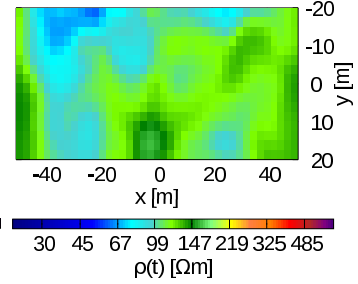
(d) Iteration=19, a priori Mo-
dell, $RMS = 7,89\%$, $\chi^2 = 0,03$



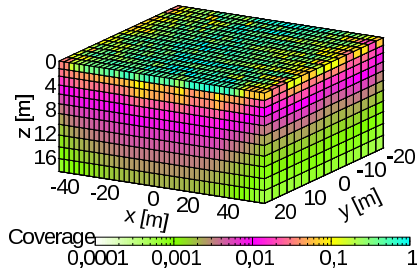
(e) $y=-10\text{ m}$



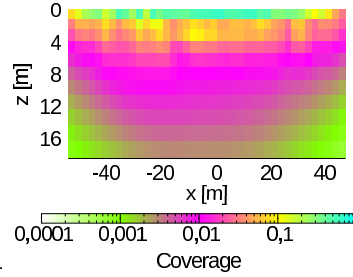
(f) $z=5\text{ m}$



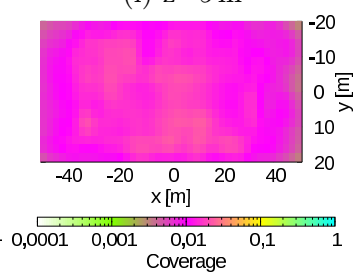
(g) Iteration=19, 80 Ωm , Co-
verage



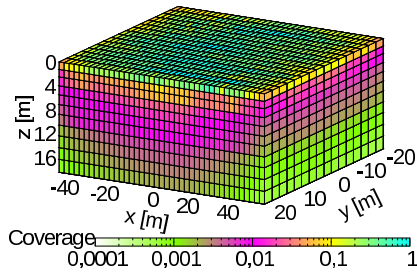
(h) $y=-10\text{ m}$



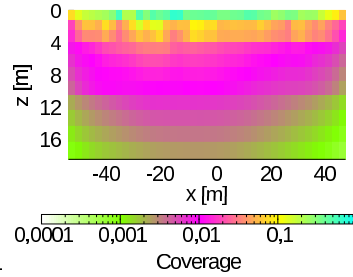
(i) $z=5\text{ m}$



(j) Iteration=19, a priori Modell,
Coverage



(k) $y=-10\text{ m}$



(l) $z=5\text{ m}$

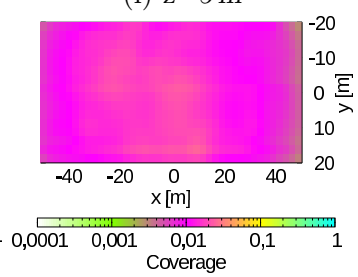


Abbildung 5.24.: (a-f) Dargestellt ist der zeitabhängige Widerstand $\rho(t)$ für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms für Inversionen mit verschiedenen Startmodellen (homogener Halbraum (a-c), a priori Modell (d-f)). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefschnitt bei $z=5\text{ m}$. Die Coverage der 19. Iteration ist für die Inversion mit homogenem Halbraum in (g-i) und mit dem a priori Modell als Startmodell in (j-l) dargestellt.

5.4.3. DC-Inversion aller Zeitpunkte

Dem Prinzip von William of Occam folgend wurde für die weiteren Inversionsschritte das einfachste Modell zur Erklärung der Messdaten bei ähnlichem Fehler gewählt. Als Startmodell der Inversion des zeitabhängigen Widerstands des vorletzten Zeitpunkts 2928 ms wurde das beste Modell der Inversion des letzten Zeitpunkts mit dem a priori Modell als Startmodell gewählt. Die Regularisierungsparameter wurden wie in Kapitel 5.24 beibehalten und das beste Modell des jeweils letzten Zeitpunkts für den folgenden Zeitpunkt als Startmodell genutzt.

In Abbildung 5.25 (a-c) ist die Verteilung des zeitabhängigen Widerstands im Untergrund für den ersten Zeitpunkt 10 ms abgebildet. Visuell sind kaum Unterschiede zum besten Modell des zeitabhängigen Widerstands des letzten Zeitpunkts in (d-f) zu erkennen. Betrachtet man jedoch die relative Differenz der Änderung des zeitabhängigen Widerstands bezogen auf den Wert des letzten Zeitpunkts, ergeben sich Änderungen bis zu 40%. In großen Bereichen liegt eine Änderung von etwa 10% vor. Zwischen 1,25-9 m Tiefe zeigt der Untergrund Differenzen kleiner als 1%.

Die gemessenen Transienten konnten mit einem durchschnittlichen RMS von 0,65% und einem durchschnittlichen χ^2 von 0,11 sehr gut angepasst werden. Um einen visuellen Eindruck der Anpassung zu bekommen, sind in Abbildung 5.25 (j) ein durchschnittlich gut angepasster, gemessener Transient (als Punkte) und der zugehörige berechnete Transient (als Linie) abgebildet. Der von allen Transienten am schlechtesten angepasste Transient mit einem RMS von 3,1% und einem χ^2 von 9,77 ist in (k) abgebildet. Mit einem $RMS = 0,02\%$ und einem $\chi^2 = 0,000001$ ist der in (l) dargestellte Transient am besten angepasst. Die Fehlerbalken der Transienten werden aus Gründen der Übersicht, in dieser und den folgenden Darstellungen der Datenanpassung, nicht dargestellt.

5.4.4. IP-Inversion aller Zellen

Die zeitabhängigen Widerstandsverteilungen aller Zeitpunkte werden zu Zelltransienten der einzelnen Zellen zusammengesetzt. Die Verteilung der IP-Parameter der Inversion beruhend auf dem Cole-Cole-Modell ist in Abbildung 5.27 dargestellt. Das Ergebnis ist unabhängig von der Wahl des Startmodells für die Relaxationszeit τ und den Frequenzexponenten c . Die Startwerte für den Gleichstromwiderstand ρ_{dc} und die Aufladbarkeit m werden entsprechend Kapitel 4.3.2 automatisch berechnet. Die Wahl der Anzahl der Iterationen, für welche nur τ und c variieren und ρ_{dc} und m festgehalten werden, beeinflusst das Inversionsergebnis und es sollten deshalb verschiedene Iterationsanzahlen getestet werden. Für die gezeigte Inversion wurden ρ_{dc} und m für 10 Iterationen festgehalten.

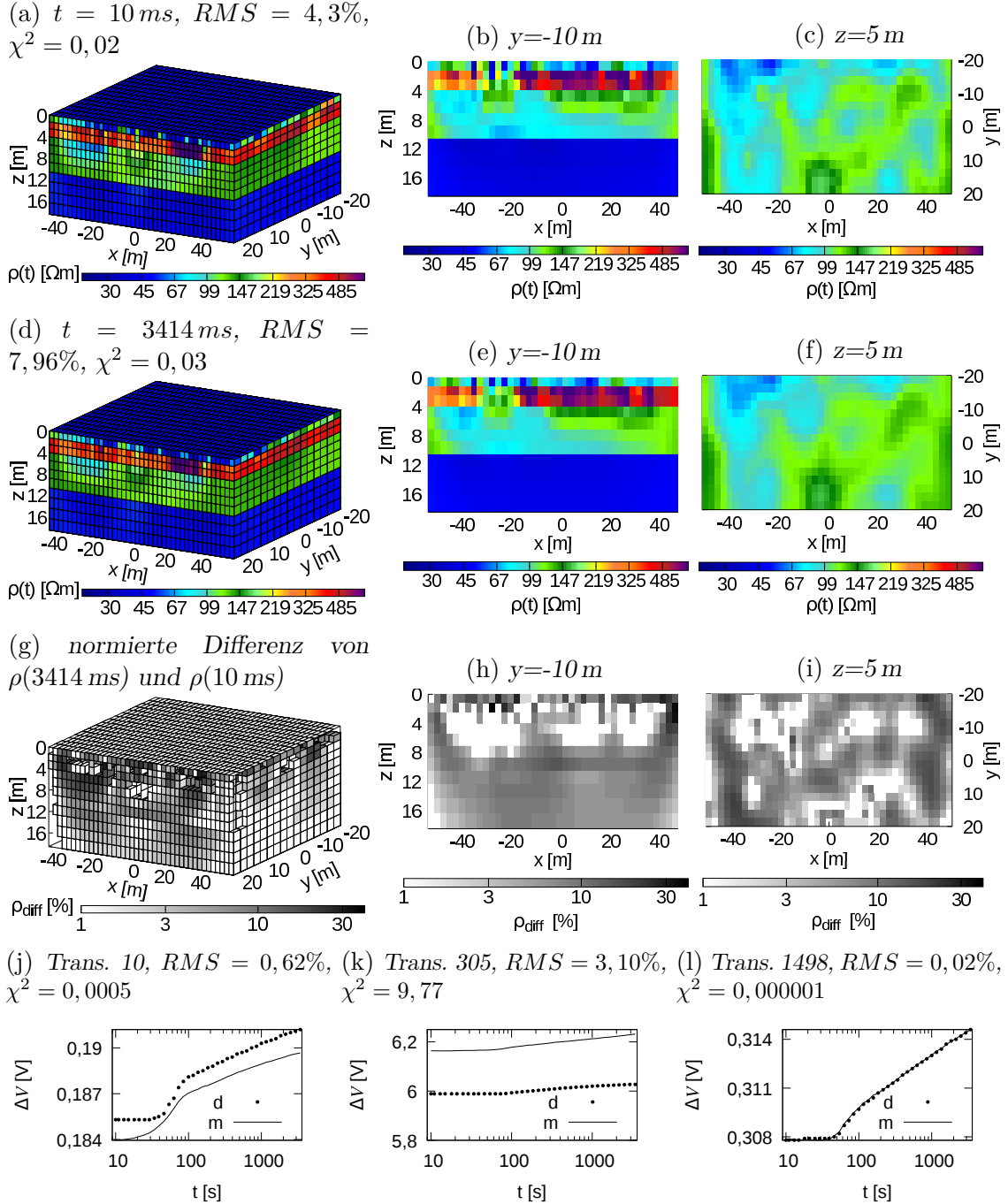


Abbildung 5.25.: Inversionsergebnis des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms (a-c) und für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms (d-f). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y = -10 \text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z = 5 \text{ m}$. Die relative Differenz der Inversionsergebnisse findet sich in (g-i). Drei gemessene Transienten und die zugehörigen berechneten Transienten sind in (j-l) abgebildet.

Die Inversion basierend auf dem Cole-Cole-Modell passt die zusammengesetzten Zelltransienten mit einem durchschnittlichen RMS von $0,57\%$ am besten an. Der Vollständigkeit halber sind die Inversionsergebnisse bei Verwendung des Madden-

Cantwell-Modells (durchschnittlicher $RMS = 1,17\%$), des Warburg-Modells (durchschnittlicher $RMS = 0,75\%$) und des Debye-Modells (durchschnittlicher $RMS = 2,31\%$) in Abbildung C.1 - C.3 abgebildet. Die Inversionsergebnisse unterscheiden sich für Gleichstromwiderstand, Aufladbarkeit und Relaxationszeit nur minimal, doch die Anpassung der Transienten ist deutlich schlechter. Mit einem fixierten Frequenzexponenten c war es nur bei einer Wahl von $c = 0,5$ möglich eine gute Anpassung zu erzielen. Die Verteilung des Frequenzexponenten ist also nicht zufällig, sondern ein $c \approx 0,5$ ist nötig um die Messdaten zu erklären. In Abbildung 5.27 (m) ist ein durchschnittlich gut angepasster, zusammengesetzter Zelltransient mit einem $RMS = 0,51\%$ dargestellt. Mit einem RMS von $1,11\%$ ist ein schlecht angepasster, zusammengesetzter Zelltransient in (n) und ein sehr gut angepasster Transient mit einem $RMS = 0,02\%$ in (o) zu finden.

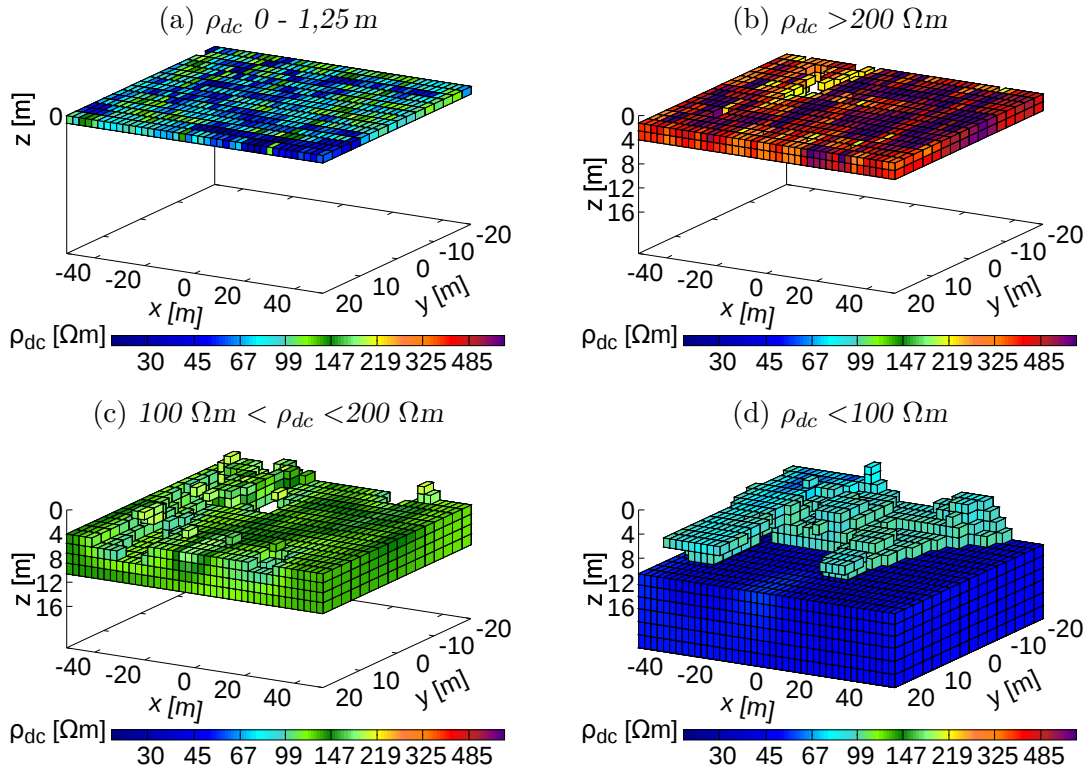


Abbildung 5.26.: Verteilung des Gleichstromwiderstands des Cole-Cole-Modells. (a) zeigt die Widerstände der ersten Schicht. In (b) sind alle Widerstände größer als 200 Ωm eingeblendet. Alle Widerstände zwischen 100 und 200 Ωm sind in (c) abgebildet. Die Widerstände kleiner als 100 Ωm sind entsprechend der Tiefe in (d) eingeblendet.

In Abbildung 5.26 findet sich eine dreidimensionale Darstellung, entsprechend des Wertes für die gesamte Tiefe, des Gleichstromwiderstands. Aus Gründen der Übersicht ist die erste Lage der Zellen in z -Richtung in Abbildung 5.26 (a) einzeln abgebildet. Bei der ersten Schicht handelt es sich mit Gleichstromwiderständen bis maximal 150 Ωm um einen guten Leiter mit einem teilweise inhomogenen Aufbau.

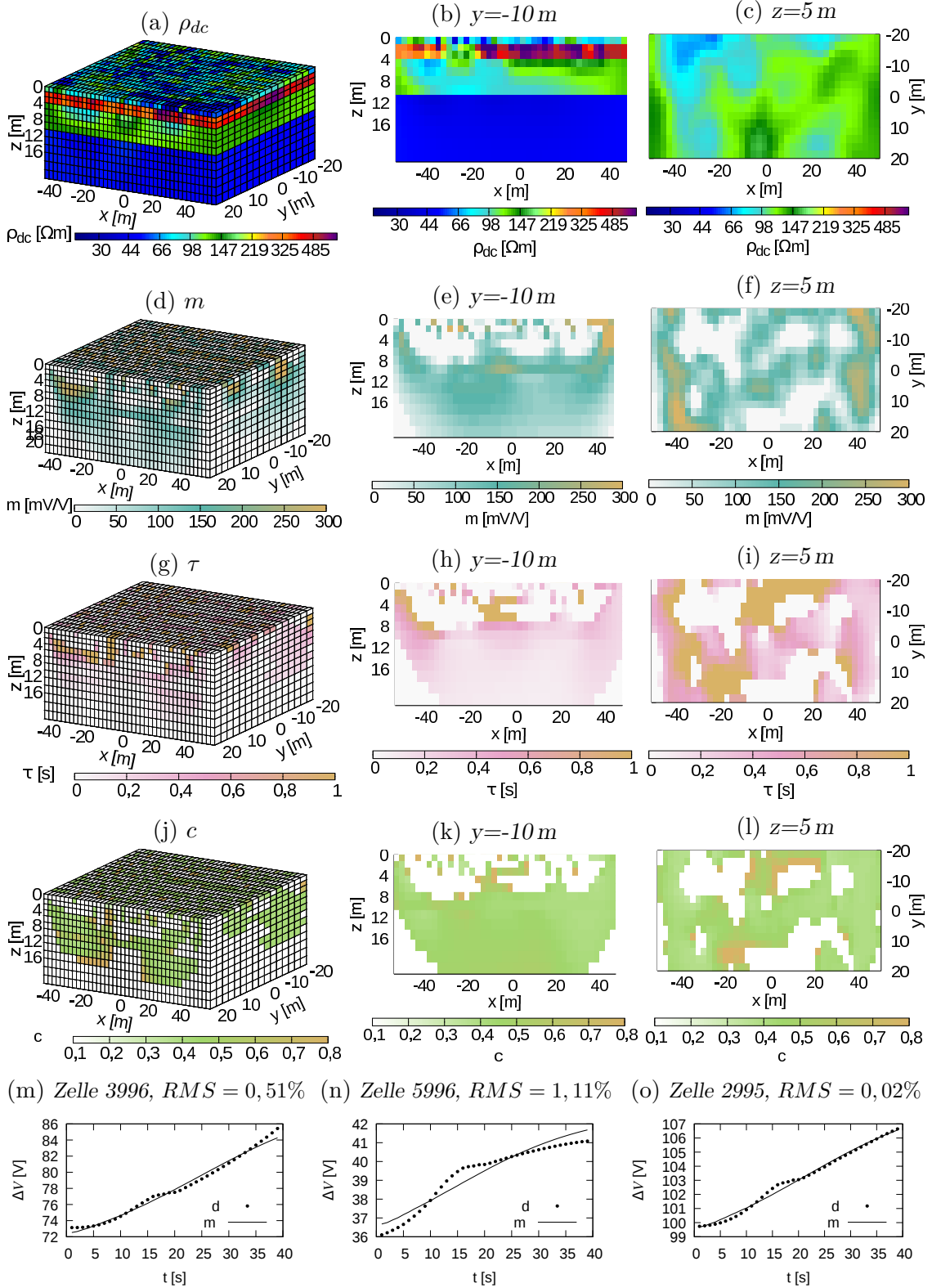


Abbildung 5.27.: Verteilung der IP-Modellparameter des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y = -10 \text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefschnitt bei $z = 5 \text{ m}$. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet.

Nur in einer Tiefe von 1,25 m bis 4 m finden sich Gleichstromwiderstände größer als $200 \Omega\text{m}$, wobei die Werte dieser zweiten, schlecht leitenden Schicht bis zu $600 \Omega\text{m}$ annehmen (siehe Abbildung 5.26 (b)). Im Bereich von $x=-31,25 \text{ m}$ bis $-18,75 \text{ m}$ und $y=-12,5 \text{ m}$ bis $-2,5 \text{ m}$ findet sich eine Unterbrechung der Schicht. In (c) kann man den stellenweise bis in 1,25 m aufsteigenden guten Leiter mit Widerständen zwischen 100 und $200 \Omega\text{m}$ erkennen. Dieser ist von einer besser leitenden Struktur (d) unterbrochen, deren Widerstände von etwa $100 \Omega\text{m}$ ab 4 m Tiefe auf etwa $40 \Omega\text{m}$ fallen. Ab einer Tiefe von 10,6 m ist der Aufbau der Schicht mit einem Gleichstromwiderstand von ca. $40 \Omega\text{m}$ sehr gleichmäßig.

Aufgrund von Unregelmäßigkeiten in der Verteilung der IP-Parameter m , τ und c vor allem in den ersten 4 m des Untergrundes ist eine Darstellung analog zu Abbildung 5.26 sehr unübersichtlich. Die Ergebnisse der Cole-Cole-Parameter ρ_{dc} , m , τ und c sind als Vertikalschnitte des 3D Modells für Profil 1 bei -10 m und für Profil 2 bei 0 m in Abbildung 5.28 dargestellt. Zudem finden sich Schnitte in Anhang C.

Die in Abbildung 5.26 unterbrochene Schichtung im Bereich von $y=-10 \text{ m}$ ist in Abbildung 5.28 (a) für Profil 1 zwischen $x=-31,25 \text{ m}$ und $x=-18,75 \text{ m}$ gut zu erkennen. Die Verteilung der Aufladbarkeit m (c) zeigt einen näherungsweise geschichteten Aufbau. In den ersten 4 Metern finden sich erhöhte Werte bis zu $500 \frac{\text{mV}}{\text{V}}$. Es folgt ein Gebiete mit kleinen Werten für m , welchem sich ab etwa 9 m ein Bereich mit $50 < m < 200 \frac{\text{mV}}{\text{V}}$ anschließt. Die Relaxationszeit τ (e) nimmt in den ersten 4 Metern Werte bis zu 1,5 s an. Es folgt ein Gebiet geringer Relaxationszeiten. Ab 9 Metern schließt sich eine Schicht mit $0,2 < \tau < 0,4 \text{ s}$ an. Auch die Verteilung des Frequenzexponenten c (g) folgt der der Aufladbarkeit und die Schicht ab etwa 9 m Tiefe ist mit Werten zwischen 0,4 und 0,5 nahezu homogen. Die Verteilungen der Aufladbarkeit, der Relaxationszeiten und des Frequenzexponenten zeigen große Ähnlichkeiten und sind von der Verteilung des Gleichstromwiderstands verschieden.

Die Verteilung des Gleichstromwiderstands für Profil 2 (b) zeigt einen geschichteten Untergrund, welcher näherungsweise als eindimensional beschrieben werden kann. Die Verteilung der drei weiteren Cole-Cole-Parameter zeigt einen unabhängigen Verlauf von der Verteilung des Gleichstromwiderstands, aber die Verteilung von τ und c folgt der von m . Für die ersten 9 Meter ist eine unregelmäßige Verteilung zu erkennen, welche große Kontraste zwischen benachbarten Zellen aufweist. Die Aufladbarkeit (d) nimmt Werte zwischen 0 und $500 \frac{\text{mV}}{\text{V}}$ an, während die Werte für τ (f) zwischen 0 und 1,5 s liegen. Die Werte für c (h) variieren zwischen 0 und 0,7. Oberflächennah treten mehr hohe Werte der drei Parameter als in einer Tiefe ab etwa 4 m auf, aber eine klare Grenze wie für Profil 1 lässt sich nicht ziehen. Ab einer Tiefe von etwa 9 m ist eine regelmäßige Verteilung von m , c und τ zu erkennen. In dieser Tiefenlage variiert m zwischen 50 und $200 \frac{\text{mV}}{\text{V}}$, τ zwischen 0,2 und

0,35 s und c zwischen 0,4 und 0,6.

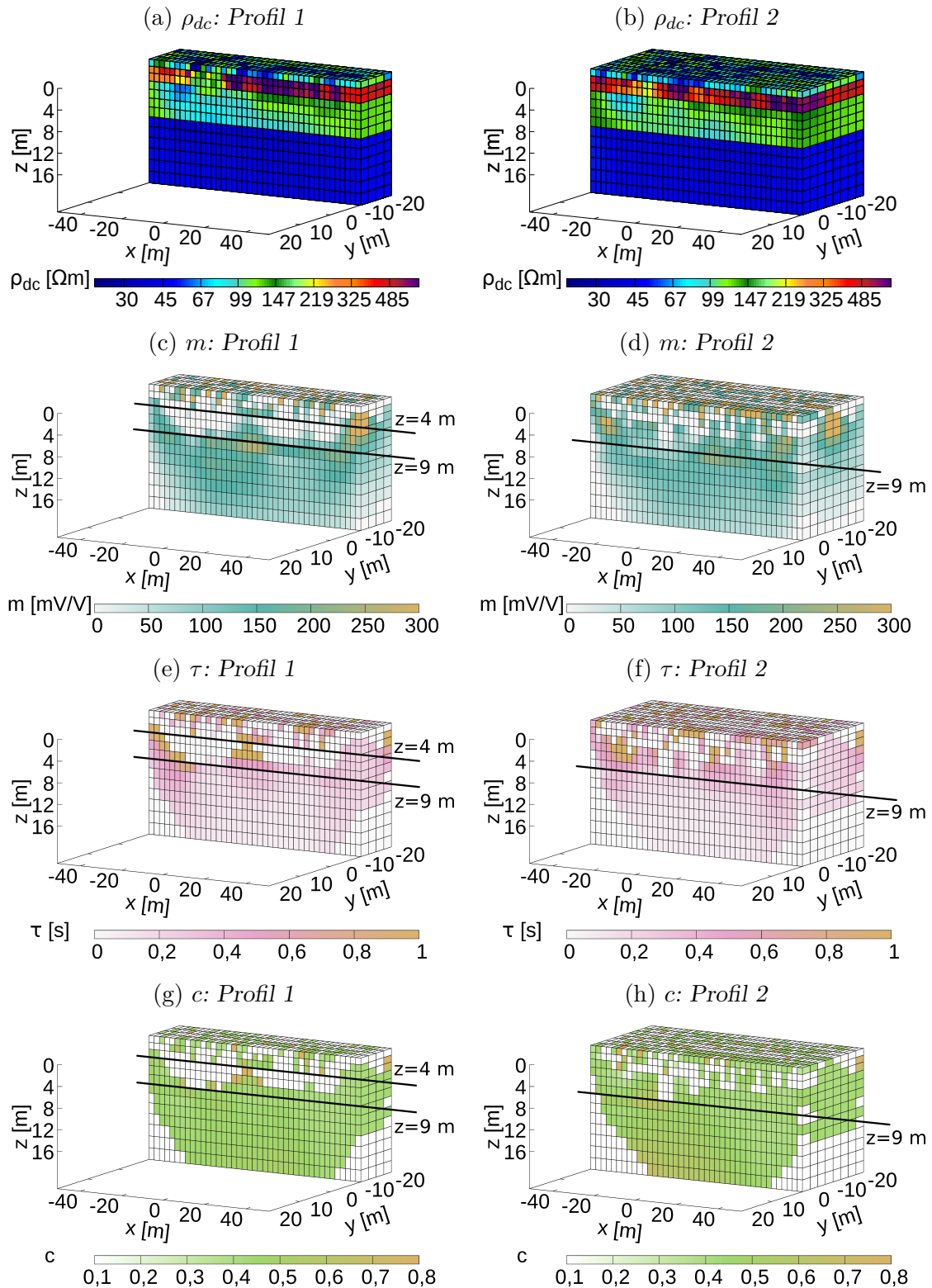


Abbildung 5.28.: Dargestellt ist die Verteilung der Cole-Cole-Parameter im Untergrund. Für das Profil 1 sind in der ersten Spalte und für Profil 2 in der zweiten Spalte in (a - b) der Gleichstromwiderstand, in (c - d) die Aufladbarkeit, in (e - f) die Relaxationszeit und in (g - h) der Frequenzexponent abgebildet.

5.5. Diskussion der Inversionsergebnisse der Felddaten

Die in Kapitel 5.4.4 gezeigten IP-Modelle werden im Folgenden diskutiert. In Kapitel 5.5.1 werden die dreidimensionalen Inversionsergebnisse des Algorithmus *IP3DInv* mit den zweidimensionalen des Programms *RES2DINV* verglichen und Unterschiede diskutiert. Ein Vergleich mit den Ergebnissen vorheriger Messungen sowie eine geologische Interpretation finden in Kapitel 5.5.2 statt.

5.5.1. Vergleich mit Ergebnissen der Inversion mit *RES2DINV*

Für den Vergleich der Inversionsergebnisse des 3D Inversionsalgorithmus *IP3DInv* in Abbildung 5.28 und des 2D Inversionsprogramms *RES2DINV* in Abbildung 5.29 wird das Profil 1 aus Abbildung 5.4 betrachtet. *RES2DINV* berechnet die Integrierte Aufladbarkeit M [ms] nach Gleichung (2.8), welche nur für einen Frequenzexponenten von $c = 1$ mit der Cole-Cole Aufladbarkeit m [$\frac{mV}{V}$] übereinstimmt. Es ist somit lediglich ein Vergleich der polarisierbaren Bereiche und des Gleichstromwiderstands möglich.

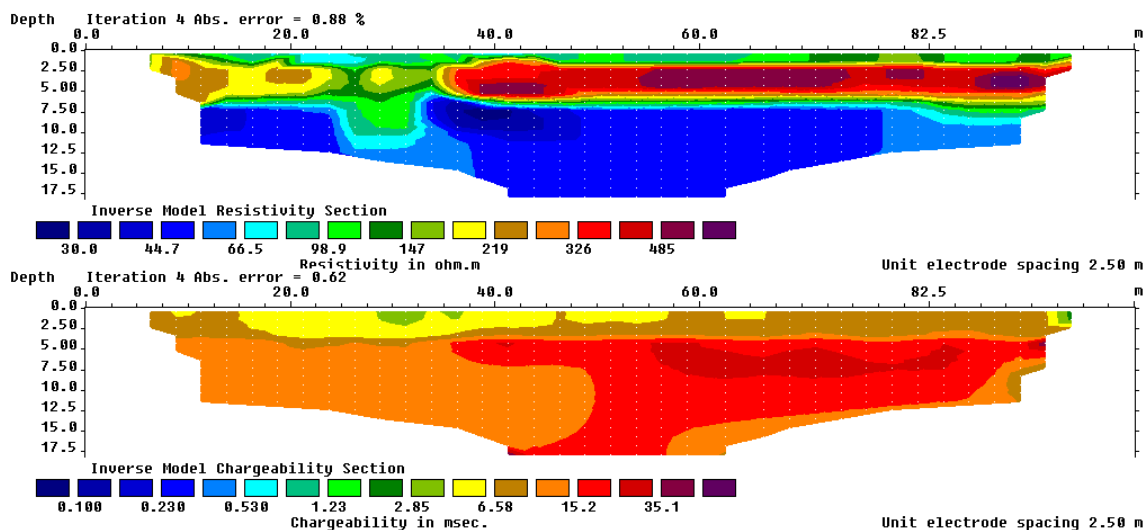


Abbildung 5.29.: Dargestellt ist das Ergebnis der Inversion mit *RES2DINV* für den Gleichstromwiderstand und die Aufladbarkeit für Profil 1. Profilmeter 20 entspricht Profilmeter -31,25 in Abbildung 5.28 und Profilmeter 82,5 entspricht Profilmeter 31,25 in Abbildung 5.28.

Mit einem $RMS = 0,88\%$ für die Inversion des Gleichstromwiderstands und einem $RMS = 0,62\%$ für das Inversionsergebnis der Aufladbarkeit M sind die Anpassung der Messdaten mit denen durch *IP3DInv* mit $0,57\%$ vergleichbar. Die Zahl der angepassten Messdaten durch die Modelle unterscheidet sich jedoch mit 196 der 2D

Inversion bzw. 1896 der 3D Inversion deutlich. Das in Abbildung 5.29 dargestellte Modell erklärt nur etwa ein Zehntel der Messdaten, welche das Modell in Abbildung 5.28 mit einer leicht besseren Anpassung erklärt. Die Inversionsergebnisse des Programms *RES2DINV* sind interpoliert dargestellt, was zu einem Verschmieren der Schichtgrenzen führen kann.

Die Verteilung des Gleichstromwiderstands zeigt für beide Inversionsergebnisse eine sehr ähnliche Struktur. Auch in Abbildung 5.29 ist ein oberflächennaher, guter Leiter mit Widerständen um $120 \Omega\text{m}$ bis knapp 2 m Tiefe zu erkennen. Es schließt sich ein schlechter Leiter mit Widerständen bis zu $600 \Omega\text{m}$ bis in 5 m Tiefe an, welcher zwischen $x=-26,25 \text{ m}$ (entspricht 25 m in Abbildung 5.29) und $x=-16,25 \text{ m}$ (entspricht 35 m in Abbildung 5.29) ebenfalls unterbrochen ist. Es folgt ein guter Leiter mit Widerständen um $40 \Omega\text{m}$, welcher bis in eine Tiefe von etwa 18 m aufgelöst wird. Die Inversionsergebnisse des Gleichstromwiderstands mit *IP3DInv* kann durch die Inversion mit *RES2DINV* bestätigt werden.

Die aufgelösten polarisierbaren Strukturen unterscheiden sich jedoch für beide Inversionen. Bis in eine Tiefe von 3,5 m ist der Untergrund mit Aufladbarkeiten M bis 10 ms gering polarisierbar. Kleinräumige Heterogenitäten, wie es die unregelmäßige Korngrößenverteilung bis in 4,5 m erwarten lässt, werden nicht dargestellt. Es schließt sich ein stärker polarisierbarer Bereich an, welcher Aufladbarkeiten zwischen 10 ms und 35 ms enthält. Ab einer Tiefe von 9 m zeigen beide Modelle einen polarisierbaren Untergrund. Berechnet man M aus den Cole-Cole-Parametern $m \approx 100 \frac{\text{mV}}{\text{V}}$ und $\tau \approx 0,3 \text{ s}$ in Abbildung 5.28 nach Gleichung (2.10), obwohl mit $c \approx 0,45$ die Bedingung $c = 1$ nicht erfüllt ist, ergibt sich ein Wert von 30 ms, welcher mit M aus Abbildung 5.29 näherungsweise übereinstimmt. Aufgrund des zu kleinen Frequenzexponenten c , kommt es zu einer Überschätzung der Integrierten Aufladbarkeit, bei einer Berechnung aus den Cole-Cole-Parametern nach Gleichung (2.10). Für eine sehr grobe Abschätzung kann Gleichung (2.10) für die Inversionsergebnisse in Abbildung 5.28 jedoch genutzt werden.

5.5.2. Vergleich mit anderen Messungen und geologische Interpretation

Für den Vergleich des Ergebnis der Inversion mit *IP3DInv* in Abbildung 5.28 mit denen von Gößling (2004) und Nix (2005) wird Profil 2 genutzt. Der Vergleich der Cole-Cole-Parameter mit den von Blaschek (2006) gezeigten und den Ergebnissen von Hördt et al. (2007) findet für Profil 1 statt. Abschließend werden die Ergebnisse der dreidimensionalen Inversion basierend auf dem Normalprofil in Abbildung 5.2 interpretiert. Die nur sehr kleinräumigen dreidimensionalen Strukturen bei einem

grundsätzlich eindimensionalem Aufbau des Untergrundes erlauben nach Kapitel 3.2.2 den Vergleich der Ergebnisse von 2D und 3D Inversionsprogrammen.

Vergleich der IP-Effekte und der Cole-Cole-Parameter für Profil 1

Die Verteilung des Gleichstromwiderstands aller drei Modelle zeigt einen ähnlichen Verlauf. Sowohl Mächtigkeiten als auch Widerstände stimmen für die ersten zwei Schichten gut überein. Die Unterbrechung der zweiten Schicht in Abbildung 5.28 (a) wird in Abbildung 5.8 und in Abbildung 5.7 (oben) aufgrund der geringeren Profillänge nur zum Teil erfasst. So entspricht Profilmeter -16 in Abbildung 5.28 Profilmeter 10 in Abbildung 5.8. Profilmeter -16 in Abbildung 5.28 entspricht Profilmeter 75 in Abbildung 5.7. Es folgt in allen drei Modellen ein guter Leiter in der Tiefe, welcher sich in Abbildung 5.28 (a) aus zwei Schichten mit Widerständen von 150 bzw. 40 Ωm zusammensetzt, und sehr gut mit der Schichtung in Abbildung 5.7 übereinstimmt. Bei Blaschek (2006) handelt es sich um eine durchgehende Schicht mit 80 Ωm .

Die Verteilung der Phase Φ in Abbildung 5.7 nach Hördt et al. (2007) und die der Aufladbarkeit m in Abbildung 5.28 zeigen sehr ähnliche polarisierbare Strukturen. Eine unregelmäßige Verteilung von polarisierbaren Bereichen, mit starken Heterogenitäten bis in eine Tiefe von etwa 4 m, ist in beiden Ergebnissen zu erkennen. Es folgt in beiden Modellen ein Bereich geringer Polarisation, welcher durch *IP3DInv* bis in eine Tiefe von 9 m aufgelöst wird. In Abbildung 5.7 liegt die untere Grenze des schwach polarisierbaren Bereichs bei etwa 10 m Tiefe.

Die Verteilung der Cole-Cole-Parameter in Abbildung 5.8 aus Blaschek (2006) und der im Rahmen der vorliegenden Arbeit ermittelten Verteilung in Abbildung 5.28 sind unterschiedlich. Die ermittelten Aufladbarkeiten bis etwa 200 $\frac{\text{mV}}{\text{V}}$ ab einer Tiefe von 9 m stimmen jedoch gut überein. Auch der Wertebereich der Relaxationszeiten stimmt mit bis zu 1 s bei Blaschek (2006) und mit bis zu 1,5 s in Abbildung 5.28 überein. Die Verteilung des Frequenzexponenten wird gegensätzlich aufgelöst. Die maximalen Werte sind mit 0,4 bzw. 0,6 jedoch beide in einem realistischen Rahmen.

Vergleich des Gleichstromwiderstands für Profil 2

Die Verteilung des Widerstands der Inversionsergebnisse aus Gößling (2004) und Nix (2005) findet sich vereinfacht in Tabelle 5.1 und die Inversionsergebnisse des Gleichstromwiderstands von *IP3DInv* in Abbildung 5.26 sind für Profil 2 in Tabelle 5.2 zusammengefasst.

Mit Gleichstromwiderständen zwischen 60 bis 100 Ωm deckt der Widerstand des Inversionsergebnis von *IP3DInv*, Profil 2 die der vorherigen Messungen sehr

Tabelle 5.2.: Verteilung des Widerstands ρ für Profil 2. Die Oberkante der s -ten Schicht wird mit d_s [m] und der Widerstand der Schicht mit ρ_s [Ωm] bezeichnet.

	d_1	ρ_1	d_2	ρ_2	d_3	ρ_3	d_4	ρ_4
<i>IP3DInv</i> , Profil 2	0	60 - 100	1,25	350 - 500	4	150	10,6	40

gut ab. Auch die Mächtigkeit der ersten Schicht mit 1,25 m ist in sehr guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen der 2D Inversionen aus Tabelle 5.1. Der Gleichstromwiderstand der zweiten Schicht liegt mit Werten von 350 bis 500 Ωm ebenfalls innerhalb des Bereichs vorheriger Messungen. Auch die Unterkante dieser Schicht wird mit 4 m als guter Mittelwert, der in Tabelle 5.1 zusammengefassten Ergebnisse, aufgelöst. Ab 4 m Tiefe ist das Inversionsergebnis für *IP3DInv*, Profil 2 in sehr guter Übereinstimmung mit dem von Hördt et al. (2007). Es wird ein guter Leiter mit 150 Ωm , gefolgt von einem guten Leiter mit 40 Ωm ab einer Tiefe von 10,6 m, aufgelöst. Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Inversionen mit *IP3DInv* in drei Dimensionen halten einem Vergleich mit 2D Inversionsergebnissen vorheriger Messungen stand. Die aufgelösten Strukturen des Gleichstromwiderstands stimmen trotz des groben Gitters sehr gut überein.

Geologische Interpretation

Die Verteilung des Gleichstromwiderstands in Abbildung 5.26 lässt sich sehr gut mit dem Normalprofil in Abbildung 5.2 korrelieren. Der gute Leiter bis in einer Tiefe von 1,25 m aus Abbildung 5.26 (a) stimmt mit dem gut durchfeuchteten Boden in Abbildung 5.2 gut überein. Der im Normalprofil folgende Mittelkies bis in eine Tiefe von etwa 4,5 m kann mit der Schichtgrenze des schlechten Leiters in Abbildung 5.26 (b) korreliert werden. Auch die starken Inhomogenitäten aufgrund des steinigen Mittelkieses spiegeln sich im Inversionsergebnis wieder. Der folgende Aquifer bis in eine Tiefe von ca. 11 m im Normalprofil wird durch einen guten Leiter bis 10,6 m Tiefe in Abbildung 5.26 (c) aufgelöst. Die Unterbrechungen der Tonlagerung in einer Tiefe von etwa 11 m Tiefe, welche in den Bohrungen festgestellt wurden, zeigt sich auch in Abbildung 5.26 (d) im Bereich von 0 bis -20 m in y-Richtung.

Die Heterogenität der Cole-Cole-Parameter in den ersten vier Metern in Abbildung 5.28 (c - h) kann durch die inhomogene Verteilung der Korngrößen in dieser Tiefenlage erklärt werden. Zwischen 4 m und 9 m Tiefe liegt für Profil 1 ein Bereich geringer Aufladbarkeit und für Profil 2 weiterhin eine heterogene Verteilung vor. Die Verknüpfung dieser Tiefenlagen mit dem Normalprofil gestaltet sich als schwierig. Ab etwa 9 m Tiefe zeigt sich eine gleichmäßige Verteilung mit Aufladbarkeiten m

von etwa $150 \frac{\text{mV}}{\text{V}}$. Ein Wechsel von kleinen zu großen IP-Effekten ist aufgrund des Wechsels von Kiesen im oberen zu Sanden im unteren Bereich in etwa 9-11 m Tiefe zu erwarten (Blaschek, 2006). Geht man davon aus, dass die Aufladbarkeit m trotz des geringen Frequenzexponenten nach Gleichung (2.10) in die Integrierte Aufladbarkeit M umgerechnet werden kann, ergibt sich für eine Relaxationszeit von 0,25 s eine Integrierte Aufladbarkeit M von 37 ms. Verglichen mit den Werten für Kies und Alluvium in Tabelle 2.1 sind diese Werte zu groß. Jedoch wird in Gleichung (2.10) $c = 1$ angenommen, was zu einer Verkleinerung von τ führen würde, so dass eine Überschätzung von M durch die Anwendung von Gleichung (2.10) realistisch erscheint (siehe auch Kapitel 5.5.1). Der Vergleich von Feld- und Labordaten wird generell als sehr schwierig eingeschätzt (Telford et al., 1990). Auch die hohe Konzentration von Chloriden und Nitrat hat möglicherweise eine Erhöhung des IP-Effekts zur Folge. Die Verteilung der Cole-Cole-Parameter kann sich unter Berücksichtigung der Umstände so ebenfalls mit dem Normalprofil korrelieren lassen und erscheint glaubwürdig.

6. Zusammenfassung und Ausblick

Der Inversionsalgorithmus *IPInv* von Hönig and Tezkan (2007) wurde erfolgreich auf drei Dimensionen erweitert. Durch das Anpassen der Programmstruktur, die Übersetzung von *Fortran 77* nach *Fortran 95* und die Parallelisierung konnte eine beachtliche Verkürzung der Rechenzeit realisiert werden. Die Laufzeit des Inversionsalgorithmus in zwei Dimensionen in Fortran 77 betrug beispielsweise auf dem Institutsrechner *TERRA* bei 27 Zeitpunkten je Transient und 200 Elektrodenkombinationen zwischen zwei und drei Wochen. Aufgrund der ursprünglichen, nicht parallelisierten Programmstruktur lief der Inversionsalgorithmus in zwei Dimensionen nur auf einem Prozessorkern. Mit der aktuellsten Version von *IP3DInv* beträgt die Rechenzeit der Inversion in drei Dimensionen für ansonsten identische Parameter auf dem Institutsrechner *TERRA* maximal einen Tag. Aufgrund der veränderten Programmstruktur läuft der Algorithmus in der aktuellsten Version auf bis zu 16 Prozessorkernen parallel. Die maximale Anzahl der gleichzeitig nutzbaren Prozessorkernen wird durch die Anzahl der Sender-Empfänger-Kombinationen begrenzt.

Die Elektrodenpositionen wurden entfixt, so dass eine Kombination aller Auslagenarten möglich sind. Mit der *msg*-Norm wurde eine weitere Form der Regularisierung implementiert, welche im Gegensatz zu der L_1 und L_2 -Norm nicht auf ein möglichst glattes Modell hinzielt und besonders bei der Inversion von blockförmigen Strukturen die Konvergenz deutlich verbessert.

Zur Erzeugung synthetischer Daten in drei Dimensionen wurde der Algorithmus *For3DIP* entwickelt. Durch einen Vergleich mit der analytischen Lösung und von Transienten, über große Wertebereiche des zeitabhängigen Widerstands, untereinander, konnte der Algorithmus *For3DIP* in Kapitel 3.2 validiert werden. Für das verwendete Gitter wurde für die verwendete Auslage ein Fehlerlevel von 5% festgestellt, welches bei der Inversion der Felddaten angewendet wurde. Studien mit dreidimensionaler Untergrundstruktur zeigen, dass der Einfluss von Blöcken auf die Form der Transienten unter Berücksichtigung des 5%igen Fehlerlevels, ab einer Entfernung in y-Richtung größer als die Ausdehnung der Blöcke in y-Richtung, vernachlässigt werden kann. Für die verwendete Auslage werden kleinräumige Auslagen stärker von dreidimensionalen Strukturen im Untergrund beeinflusst als Auslagen mit einer größeren Gesamtlänge. Der benötigte Abstand verkleinert

sich mit abnehmender Störkörpergröße und steigendem Gleichstromwiderstand des Störkörpers. Aufgrund des nahezu eindimensionalen Untergrunds mit nur sehr kleinen heterogenen Bereichen im Messgebiet kann man den Vergleich von Ergebnissen der zweidimensionalen und dreidimensionalen Inversion rechtfertigen.

Die in Kapitel 3.2 vorwärtsgerechneten Modelle konnten durch die Inversion mit *IP3DInv* in Kapitel 4.4 reproduziert werden. Die sensitiven Bereiche entsprechend der Coverage stimmen gut mit den ungefähren Eindringtiefen und den aufgelösten Bereichen der IP-Parameter überein. Die Wahl des Regularisierungsparameters ist entscheidend für das Konvergenzverhalten der Inversion, und sollte durch das L-Curve-Verfahren und einen visuellen Vergleich von Inversionsergebnissen gewählter Regularisierungsparameter gestützt werden. Der Gleichstromwiderstand konnte in allen durchgeführten Studien sehr gut reproduziert werden. Die Lage und Ausdehnung dreidimensionaler Störkörper wird bei Verwendung der *msg*-Norm sehr gut wiedergegeben. Auch die in Verbindung mit einer stark inhomogenen Verteilung der Polarisierung möglichen negativen IP-Effekte, können mit dem Algorithmus angepasst werden. Bei polarisierbaren Störkörpern mit einem relativ zum Hintergrund erhöhten Gleichstromwiderstand kann es, aufgrund der zunehmenden Maskierung der tiefer liegenden Modellbereiche für frühe Zeiten, zu Inversionsartefakten kommen. Betroffen davon sind vor allem die Relaxationszeit und der Frequenzexponent, wohingegen der Gleichstromwiderstand und die Aufladbarkeit weniger stark beeinflusst werden. Auch IP Effekte mit einer geringen Aufladbarkeit können ohne Beschränkung für Relaxationszeit und Frequenzexponenten invertiert werden, und liefern realistische Parameterkombinationen. Neben dem Cole-Cole Modell wurde das Madden-Cantwell-Modell, welches mit einem $c = 0,25$ für die meisten Gesteine gut verwendet werden kann, sowie das Warburg- und das Debye-Modell implementiert.

Die 1896 Zeitreihen, aufgezeichnet auf neun Profilen in Krauthausen, Jülich im Jahr 2012, konnten erfolgreich durch ein dreidimensionales IP-Modell des Untergrunds erklärt werden (siehe Kapitel 5). Durch die Verwendung des *Terrameter LS* und die Nutzung der neu entwickelten Preprocessing-Routine konnten Zeitpunkte zwischen 10 und 3414 ms für die Inversion verwendet werden, so dass 2,5 Dekaden abgedeckt wurden. Durch die Verwendung der frühen Zeiten, welche die Dynamik des Transienten besonders gut abdecken, konnten auch geringe Polarisierungseffekte realistisch aufgelöst werden. Die Inversion nach den IP-Parametern ist, durch die Implementierung einer automatischen Wahl des Startwerts des Gleichstromwiderstands und der Aufladbarkeit, zudem unabhängig vom Startmodell. Die Inversion konvergierte für alle gewählten Kombinationen von Relaxationszeit und Frequenzexponent innerhalb des Definitionsbereichs. Die Inversionsergebnisse des Gleichstrom-

widerstands stimmen sehr gut mit denen anderer Methoden überein. Die Verteilung der weiteren drei IP-Parameter stimmt mit den polarisierbaren Strukturen aufgelöst durch die Frequenzbereichs-Messungen von Hördt et al. (2007) sehr gut überein. Der von Blaschek (2006) aufgelöste Wertebereich der IP-Parameter, nicht aber die Verteilung im Untergrund, stimmt mit dem 3D IP-Inversionsergebnisse gut überein. Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten IP-Inversionen von ganzen Zeitreihen mit *IP3DInv* in drei Dimensionen halten einem Vergleich mit 2D Inversionsergebnissen vorheriger Messungen stand und werden durch diese bestätigt.

Die Verteilung des Gleichstromwiderstands lässt sich sehr gut mit dem geologischen Normalprofil des Messgebiets korrelieren. Die Heterogenität der Cole-Cole-Parameter in den ersten Metern kann durch die inhomogene Verteilung der Korngrößen in dieser Tiefenlage gut erklärt werden. Mit zunehmender Tiefe zeigt sich eine gleichmäßige Verteilung der IP-Parameter, was sich mit der homogenen Korngrößenverteilung korrelieren lässt. Im Bereich von Profil 1 ist ein Wechsel von einem unpolarisierbaren zu einem polarisierbaren Bereich in einer Tiefenlage von etwa 9 m zu erkennen. Dieser lässt sich gut durch den Wechsel von Kiesen zu Sanden im Normalprofil in etwa 10 m Tiefe erklären. Rechnet man die Aufladbarkeit m näherungsweise in die integrierte Aufladbarkeit M um, ergeben sich Werte, welche verglichen mit Literaturwerten zu hoch sind, aber in einem realistischen Rahmen liegen. Die Überschätzung kann an falschen Annahmen beim Umrechnen der Aufladbarkeiten liegen oder durch die hohe Konzentration von Chloriden und Nitrat im Messgebiet erklärt werden.

Das Berechnen der Regularisierungsmatrix ist zeitlich proportional zum Quadrat der Gitterzellenanzahl und ist in der aktuellen Version von *IP3DInv* der größte limitierende zeitliche Faktor. Das Beschleunigen dieser Berechnung eröffnet die Möglichkeit der Nutzung feinerer Gitter und die genauere Auflösung der Untergrundstruktur. Besonders im Hinblick auf stark heterogene Messgebiete und kleinräumige Strukturen scheint dies zukünftig von großer Bedeutung.

Zur weiteren Verifizierung sollte der Inversionsalgorithmus auf Daten aus Messgebieten mit höheren Polarisierungseffekten angewendet werden. Besonders der Vergleich von verschiedenen Regularisierungsansätzen und dem Konvergenzverhalten kann so genauer für Messdaten untersucht werden. Die Anwendung von gleichmäßig verteilten Elektrodenpositionen auf einem Raster, und die damit variablen Elektrodenkombinationen, wäre eine interessante Folgeuntersuchung. Mit dem *Terra-meter LS* könnten so möglicherweise sogar Messungen beispielsweise kreisförmiger Profile realisiert werden. Ebenso würden sich Tracer-Experimente anbieten, welche Aufschluss über mögliche Zusammenhänge von hydrogeologischen, elektrischen und IP-Parametern geben könnten.

A. Variablen

Wichtige in dieser Arbeit verwendete Variablen, ihre Bedeutung und Einheit sind in der Tabelle A.1 aufgelistet.

Tabelle A.1.: *Verwendete Variablen, ihre Bedeutung und Einheit*

Name	Bedeutung
A	Kopplungskoeffizientenmatrix
a_{cc}	Anzahl der IP-Modellparameter
a_p	Anzahl der Gitterparameter
a_t	Anzahl der verwendeten Zeitpunkte
a_z	Anzahl der Gitterzellen
α_r	Abszissenwerte des Filters mit den Filterkoeffizienten ζ_r
b	Quelltermvektor [A/m ³]
B	magnetische Flussdichte [T=Vs/m ²]
β	Stabilisierungsparameter
C	Coverage-Matrix
c	Frequenzexponent im Cole-Cole Modell
c0 – c6	Kopplungskoeffizienten
χ^2	Quadratische Anpassung gewichtet mit dem Messfehler
d	Strommoment einer elektrischen Quelle [Am]
D	Messdatenvektor
δ	Dirac-Funktion
E	elektrische Feldstärke [V/m]
ϵ	relative Standardabweichung
ε	Dielektrizitätskonstante [As/Vm] $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$
ε_0	Dielektrizitätskonstante im Vakuum $\approx 8,854 \cdot 10^{-12}$ As/Vm
ε_r	relative Dielektrizitätskonstante
f	Gitterzellenabmessungen in x-Richtung
F	Modelldatenvektor
FE	Frequenzeffekt
g	Gitterzellenabmessungen in y-Richtung
G	Glättungsmatrix der lokalen Glättung

γ	Parameter der msg Regularisierung
\mathbf{H}	magnetische Feldstärke [A/m]
h	Gitterzellenabmessungen in z-Richtung
$H(\omega)$	frequenzabhängigkeit des Sendestroms
$H(t)$	Heavyside-Funktion
\mathbf{I}	Einheitsmatrix
I	elektrische Stromstärke [A]
i_m	Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung
i	$\sqrt{-1}$
I_p	elektrische Stromstärke des primären Sendestroms [A]
\mathbf{J}	elektrischen Stromdichte [A/m ²]
j_m	Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung
\mathbf{K}	Transformationsmatrix
\mathbf{k}	Konfigurations- oder Geometriefaktor
L	Iterationsnummer
\mathbf{L}	Untere Dreiecksmatrix der Cholesky-Zerlegung
k_m	Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung
λ	Regularisierungsparameter
m	Aufladbarkeit im Cole-Cole Modell
\mathbf{m}_L	Modell des Untergrundes der Iteration L
$\delta\mathbf{m}_L$	Modell-Update der Iteration L
MF	Metallfaktor [S/m]
n	Ionenkonzentration des Elektrolyts [1/m ³]
N_d	Anzahl der verwendeten Sender-Empfänger-Kombinationen
∇	Nabla-Operator für räumliche Differentiation in [1/m]
ν	Potentialgradient
ω	Kreisfrequenz [1/s]
∂	partielle Ableitung
p	Nummer der aktuellen Sender-Empfänger-Kombination
PFE	Prozentualler Frequenzeffekt
Φ	Phase der Frequenzbereichs-Messung [mrad]
Φ	Ziel- bzw. Kostenfunktion
$\Phi_d(\mathbf{m})$	Funktion der Anpassung der Messdaten
$\Phi_d(\mathbf{m})$	zusätzliche gefordertes Kriterium der Kostenfunktion
\mathbf{q}	elektrische Raumladungsdichte [C/m ³ =As/m ³]
Q	Quellterm
rel	relatives Fehlerlevel [%]
\mathbf{r}_0	Ortsvektor [m]

$R(\omega)$	Gesamtwiderstand der Ersatzschaltung [ωm]
R_1	elektrolytisch leitender Anteil der Poren mit Körnern
R_0	Parallelwiderstand von Poren ohne Störung [ωm]
ρ	spezifischer elektrischer Widerstand [Ωm]
ρ_{dc}	spezifischer Gleichstromwiderstand [ωm]
RMS	Anpassung gewichtet mit dem Messwert (Root Mean Square Error)
S	Sensitivitätsmatrix
s	volumen-gewichtete Zelleitfähigkeiten
σ	elektrische Leitfähigkeit [S/m]
t	Zeit [s]
τ	Relaxationszeit im Cole-Cole Modell [s]
τ_q	finites Quelltermelement
U	Spannung [V]
U_p	maximaler Spannungswert [V]
U_s	Spannungswert direkt nach dem Anschalten des Sendestroms [V]
V	elektrisches Potential [V]
v	Zellvolumen
W	Fehler-Kovarianz-Matrix
w_x, w_y, w_z	Wichtungsparameter der Glättung in x-, y- und z-Richtung
x	Kartesische Koordinate in horizontaler Richtung
x	Potentialvektor
y	Kartesische Koordinate in horizontaler Richtung
Z_m	Wirkung der Grenzschicht von Metall und Tonkörnern
z	Kartesische Koordinate in vertikaler Richtung
ζ_r	Filterkoeffizienten des Filters mit den Abszissenwerten α_r

B. Anhang zu Modellstudien mit *IP3DInv_{DC}* und *IP3DInv_{IP}* (4.4)

Das Ergebnis der IP-Inversion aus Kapitel 4.4 für das Warburg-Modell mit $c = 0,5$ ist in Abbildung B.1 dargestellt. Das IP-Modell mit einem zugrunde liegenden Modell nach Debye mit $c = 1$ ist in Abbildung B.2 dargestellt. Die Abbildungen sind analog zu Abbildung 4.7 aufgebaut.

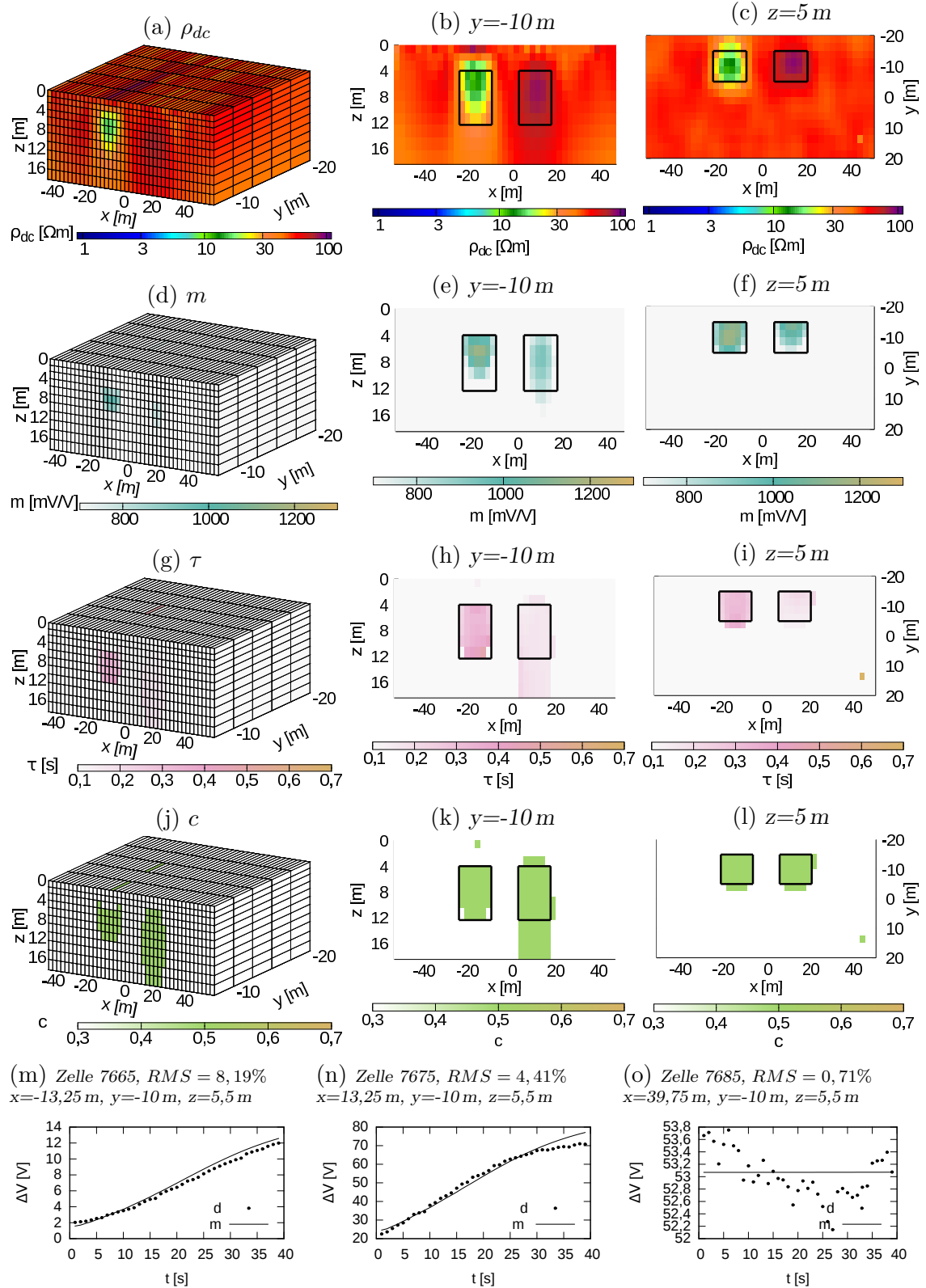


Abbildung B.1.: Verteilung der IP Modellparameter des Warburg Modells ($c = 0,5$) mit einem durchschnittlichen $RMS = 1,52\%$. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5\text{ m}$. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet.

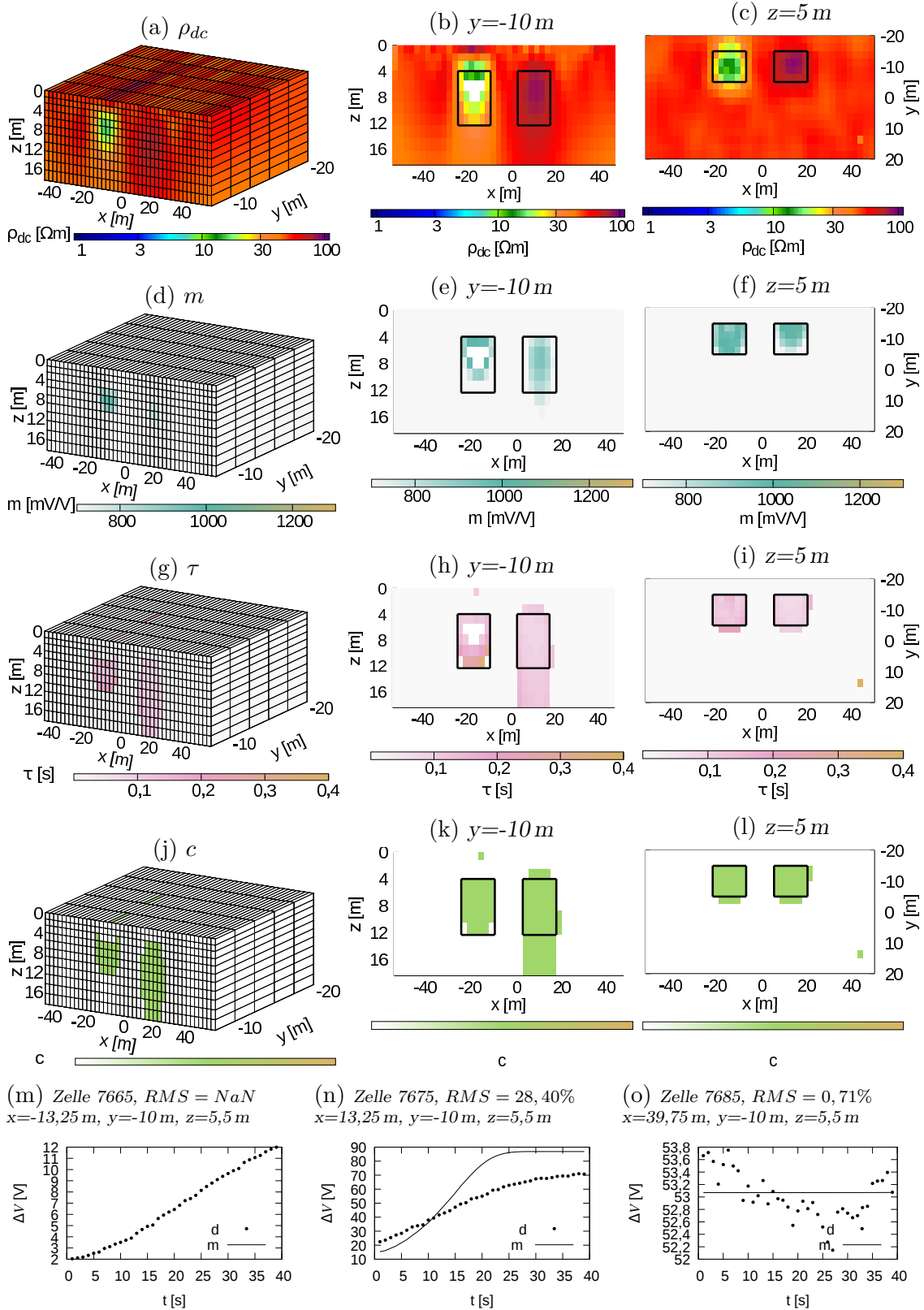


Abbildung B.2.: Verteilung der IP Modellparameter des Debye Modells ($c = 1$) mit einem durchschnittlichen $RMS = 5,56\%$. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5\text{ m}$. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet.

C. Anhang zu IP-Inversion aller Zellen (5.4.4)

Das Ergebnis der IP-Inversion aus Kapitel 4.4 für das Madden-Cantwell-Modell mit $c = 0,25$ ist in Abbildung C.1 dargestellt. Das Warburg-Modell mit $c = 0,5$ ist in Abbildung B.1 dargestellt. Das IP-Modell mit einem zugrunde liegenden Modell nach Debye mit $c = 1$ ist in Abbildung B.2 dargestellt. Die Abbildungen sind analog zu Abbildung 4.7 aufgebaut.

In Abbildung C.4 sind Vertikal- und Horizontalschnitte des Gleichstromwiderstands der IP-Inversion mit dem Cole-Cole-Modell dargestellt. In Abbildung C.5 sind Vertikal- und Horizontalschnitte der Aufladbarkeit der IP-Inversion mit dem Cole-Cole-Modell dargestellt. In Abbildung C.6 sind Vertikal- und Horizontalschnitte der Relaxationszeit der IP-Inversion mit dem Cole-Cole-Modell dargestellt. In Abbildung C.7 sind Vertikal- und Horizontalschnitte des Frequenzexponenten der IP-Inversion mit dem Cole-Cole-Modell dargestellt.

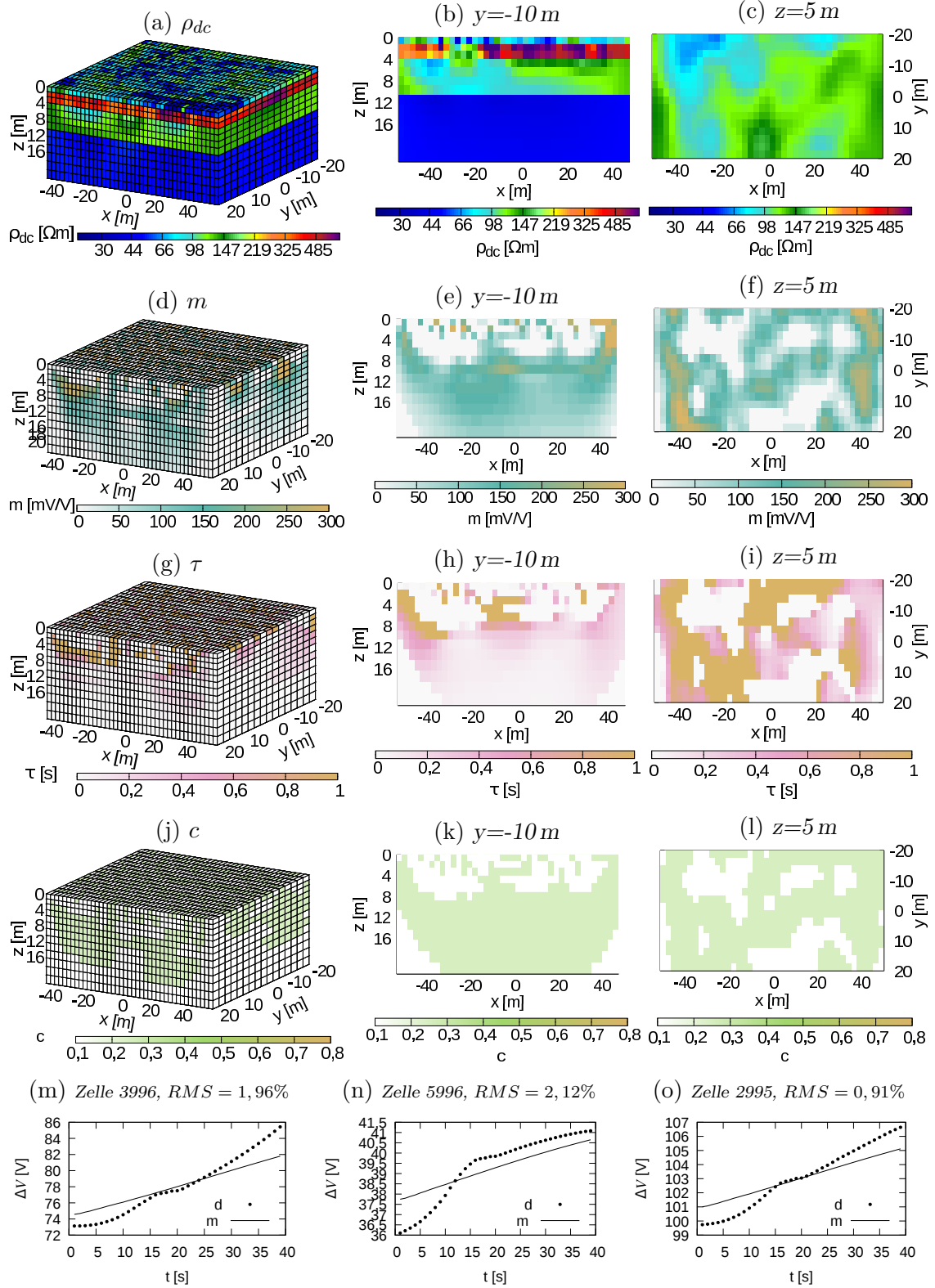


Abbildung C.1.: Verteilung der IP Modellparameter des Madden-Cantwell Modells. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefschnitt bei $z=5\text{ m}$. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet.

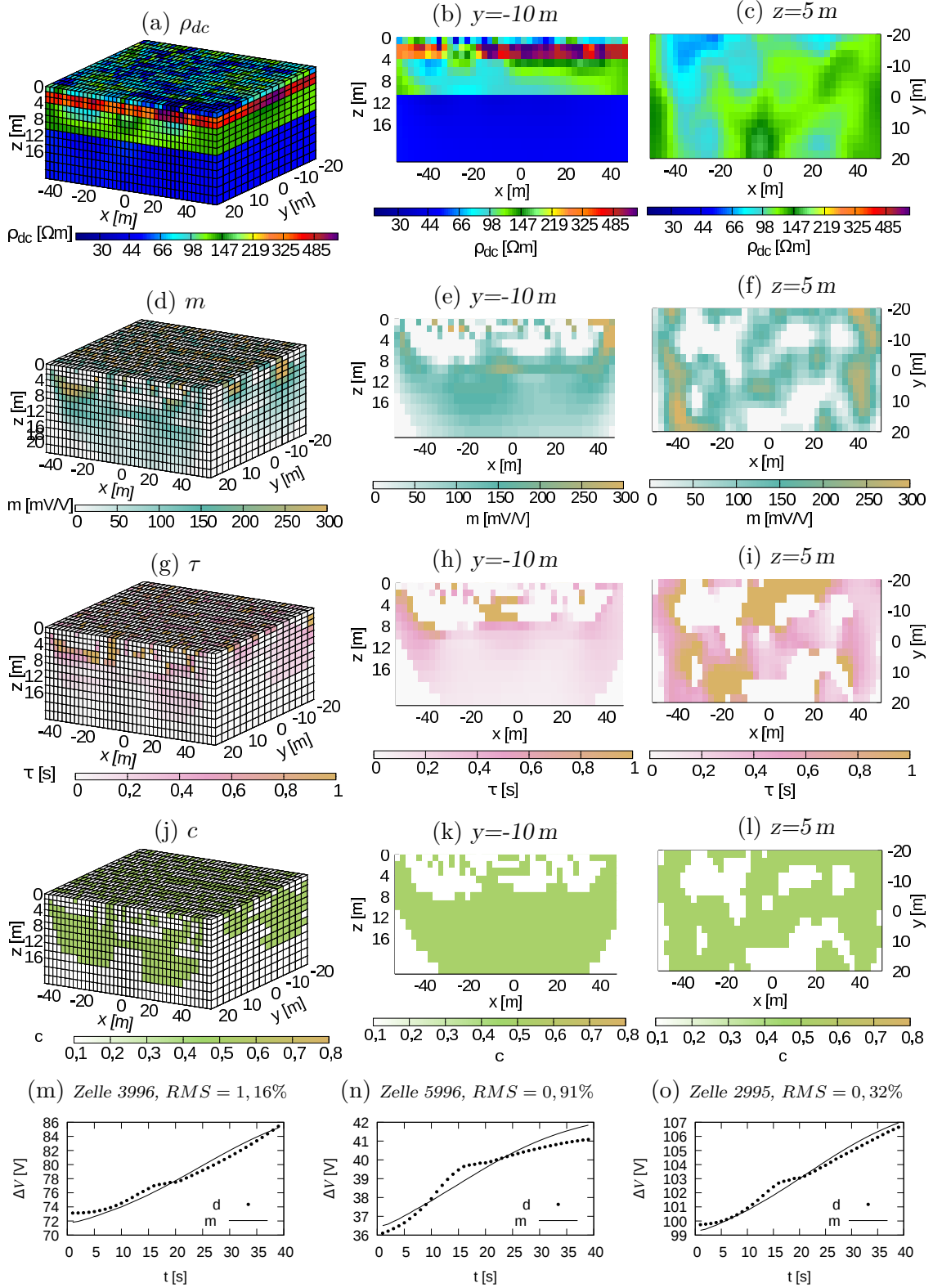


Abbildung C.2.: Verteilung der IP Modellparameter des Warburg Modells. Dar-
gestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die
Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist
der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei
 $y=-10\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefschnitt bei $z=5\text{ m}$. Drei zu-
sammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o)
abgebildet.

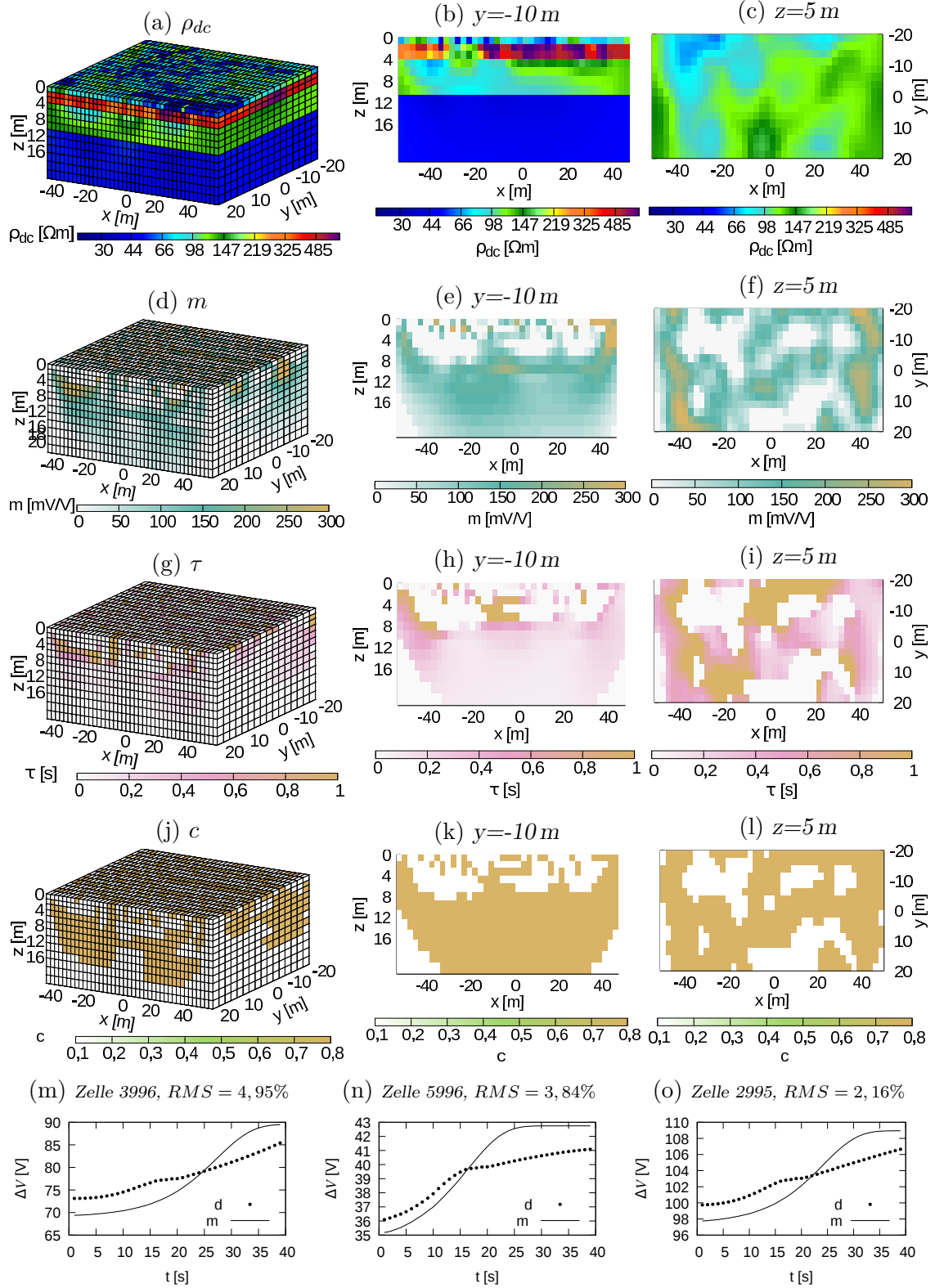


Abbildung C.3.: Verteilung der IP Modellparameter des Debye Modells. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10\text{ m}$ und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefschnitt bei $z=5\text{ m}$. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet.

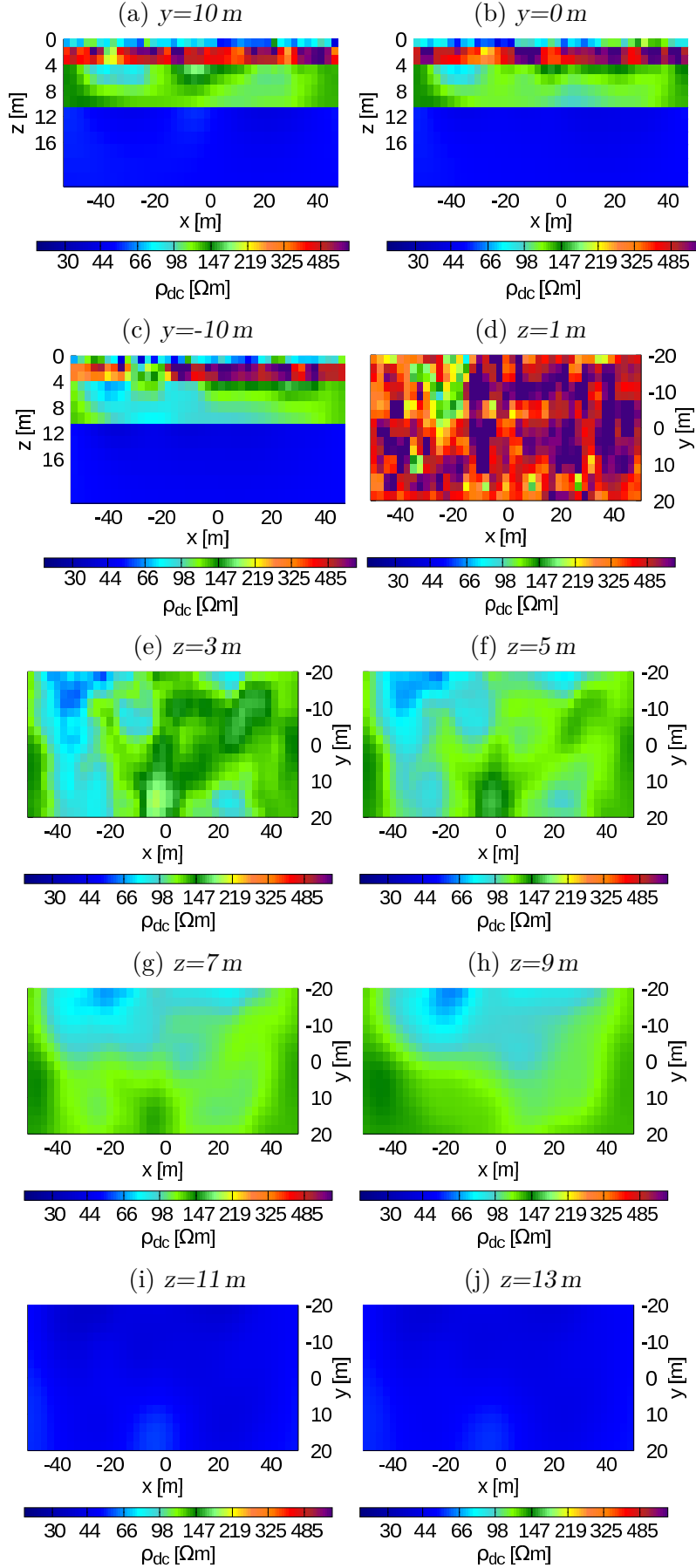


Abbildung C.4.: Verteilung des Gleichstromwiderstands des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind Vertikalschnitte bei $y=10$, 0 und -10 m und Horizontalschnitte bei $z=1$, 3 , 5 , 7 , 9 , 11 und 13 m . Der RMS der IP-Inversion beträgt $0,57\%$.

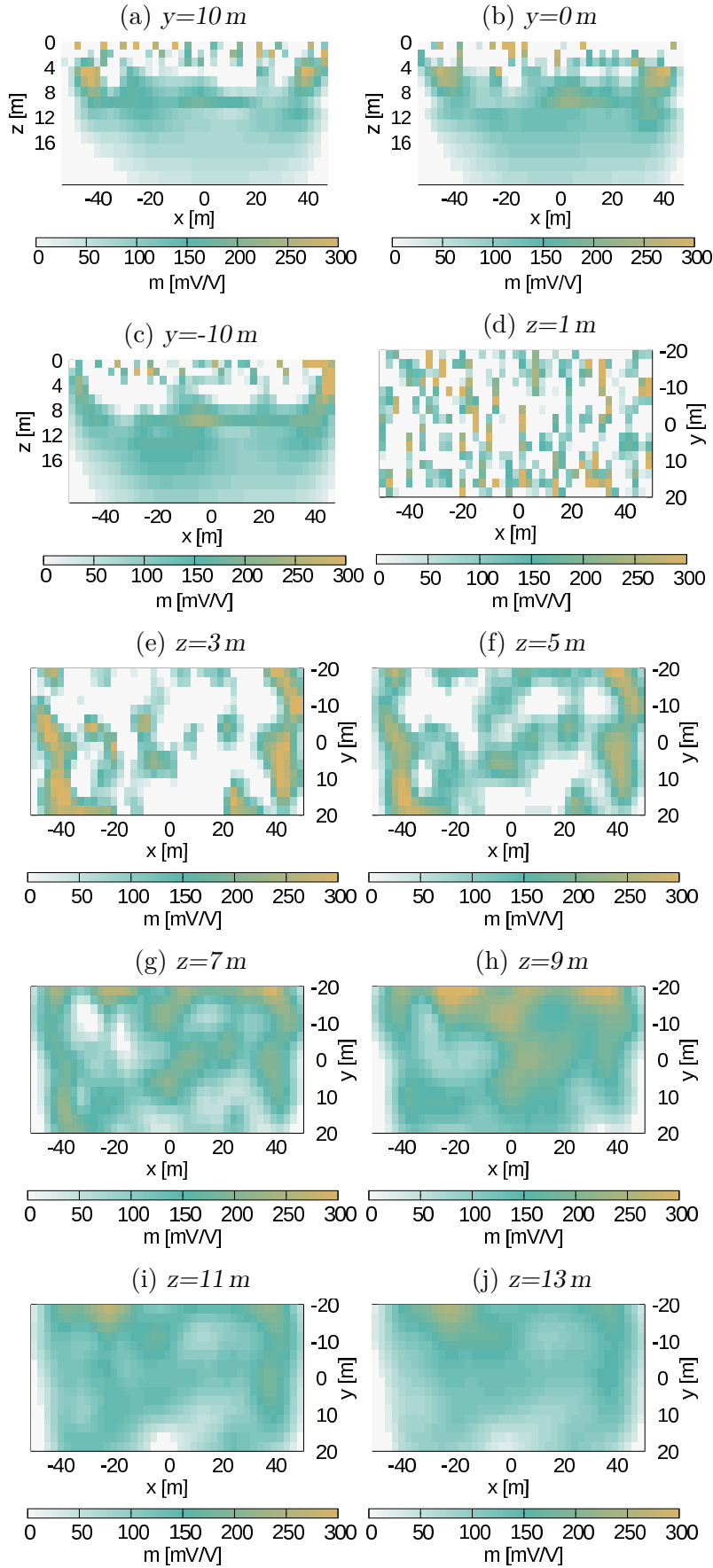


Abbildung C.5.: Verteilung der Aufladbarkeit des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind Vertikalschnitte bei $y=10$, 0 und -10 m und Horizontalschnitte bei $z=1$, 3 , 5 , 7 , 9 , 11 und 13 m. Der RMS der IP-Inversion beträgt $0,57\%$.

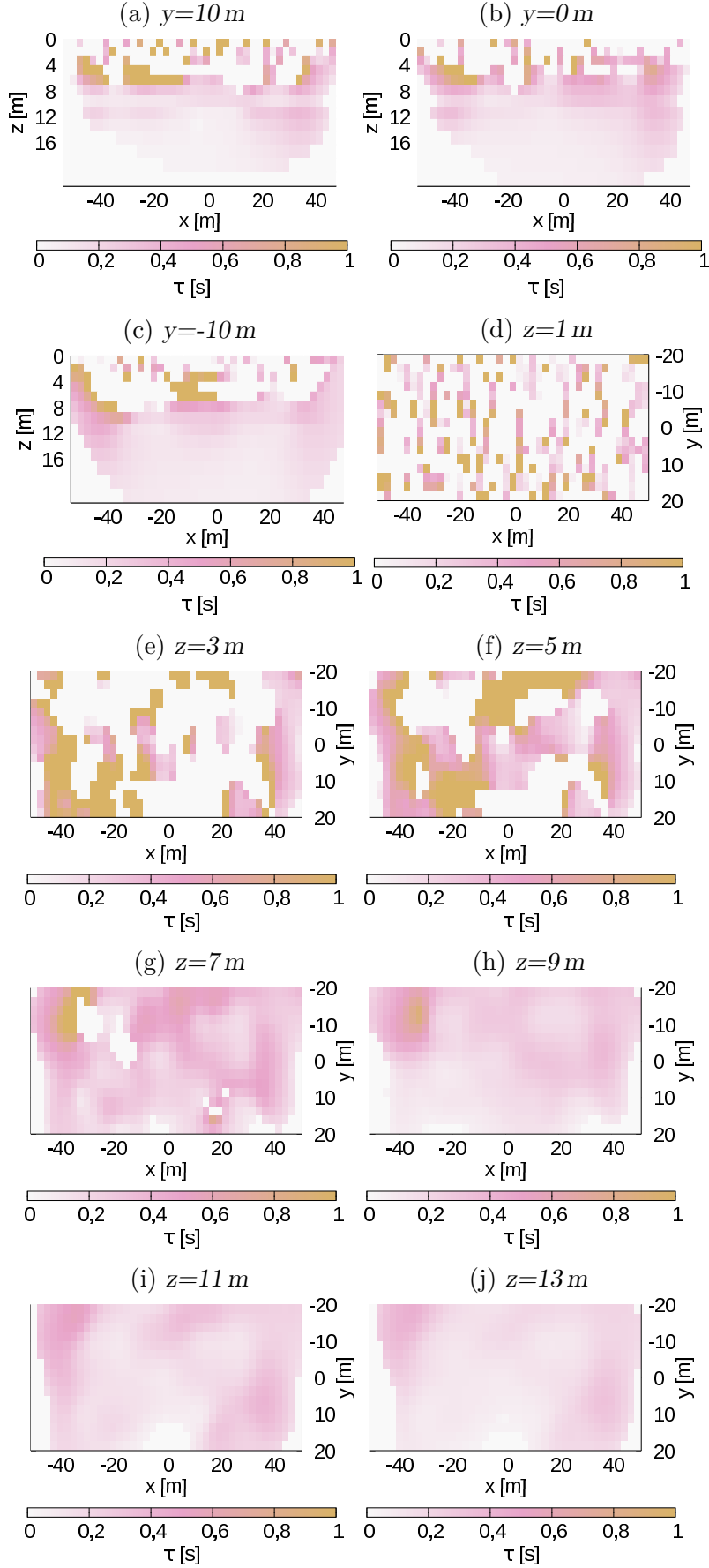


Abbildung C.6.: Verteilung der Relaxationszeit des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind Vertikalschnitte bei $y=10$, 0 und -10 m und Horizontalschnitte bei $z=1$, 3 , 5 , 7 , 9 , 11 und 13 m. Der RMS der IP-Inversion beträgt $0,57\%$.

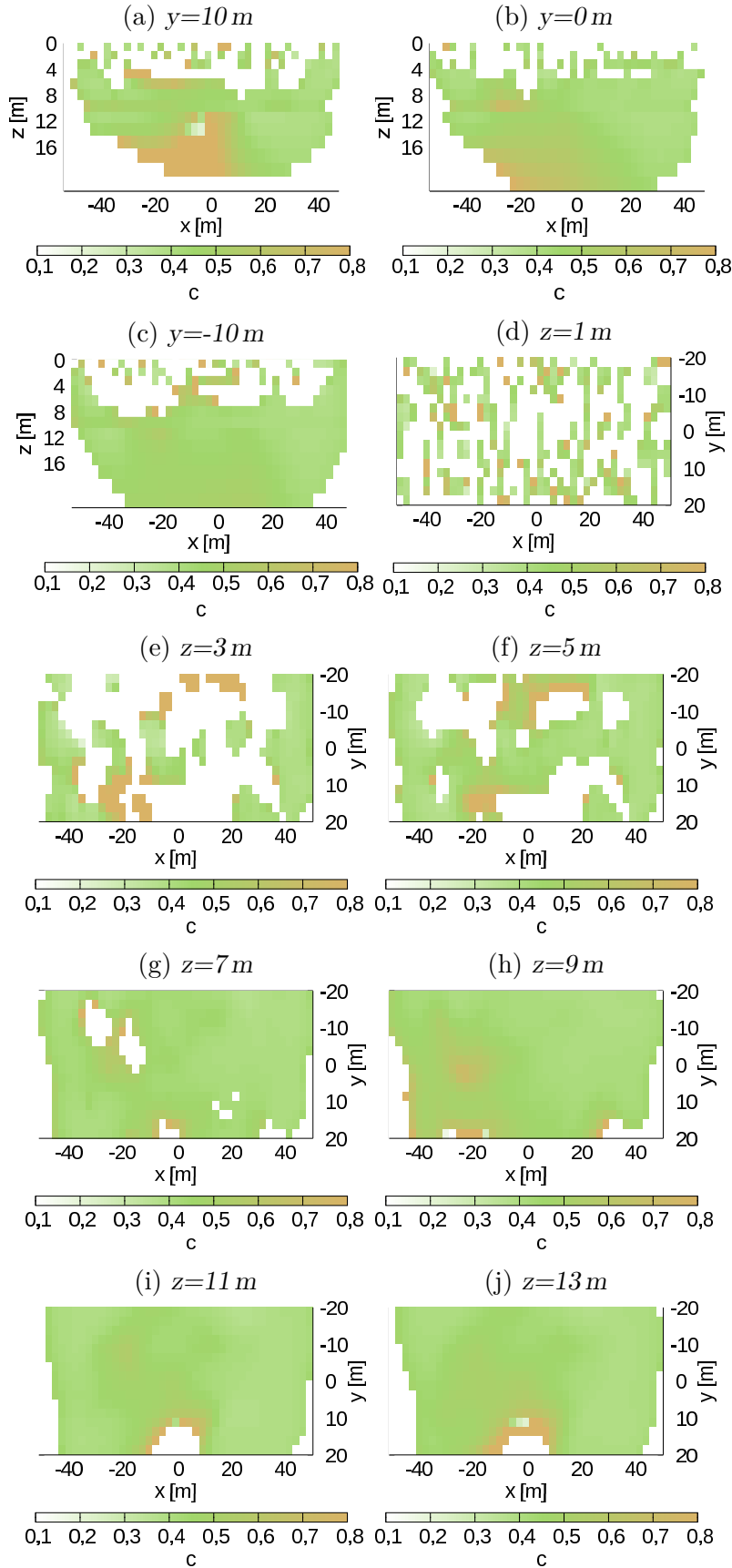


Abbildung C.7.: Verteilung des Frequenzexponenten des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind Vertikalschnitte bei $y=10$, 0 und -10 m und Horizontalschnitte bei $z=1$, 3 , 5 , 7 , 9 , 11 und 13 m . Der RMS der IP-Inversion beträgt $0,57\%$.

D. Manual zu *For3DIP*

Der Algorithmus *For3DIP* berechnet für eine beliebige Elektrodenverteilung an der Oberfläche oberhalb eines polarisibaren oder unpolarisierbaren dreidimensionalen Untergrundes IP Transienten im Zeitbereich. Das Flussdiagramm zum Aufbau des Programms in Abbildung D.1 beinhaltet die verwendeten **Routinen**, *Ein-* und *Ausgabedateien*.

D.1. Kompilieren und Ausführen

Der folgende Befehl wird zum Kompilieren des Programms ***For3DIP*** verwendet:

```
gfortran -fopenmp -mcmodel=large -o For3DIP For3DIP.f95 guppy.f95 dreid.f95  
dirichlet.f95 sym.f95 cgpc.f95 skal.f95 ab.f95 eqsolv.f95
```

Der folgende Befehl wird zum Ausführen des Programms ***For3DIP*** verwendet:

```
./For3DIP
```

D.2. Aufbau des Programms *For3DIP.f95*

Im Folgenden wird der Aufbau des Programms *For3DIP* beschrieben.

Read forward_model.mod and write forward_*.mod for each parameter

reading IP model Einlesen des Input-Files *forward_model.mod*, welches das Gitter, die Blöcke und die entsprechenden Werte für Widerstand ρ , Aufladbarkeit m , Relaxationszeit τ und Frequenzexponent c enthält.

define rho,m,tau and c for each cell für jede Zelle werden Widerstand ρ , Aufladbarkeit m , Relaxationszeit τ und Frequenzexponent c entsprechend des Vorwärtsmodells festgelegt.

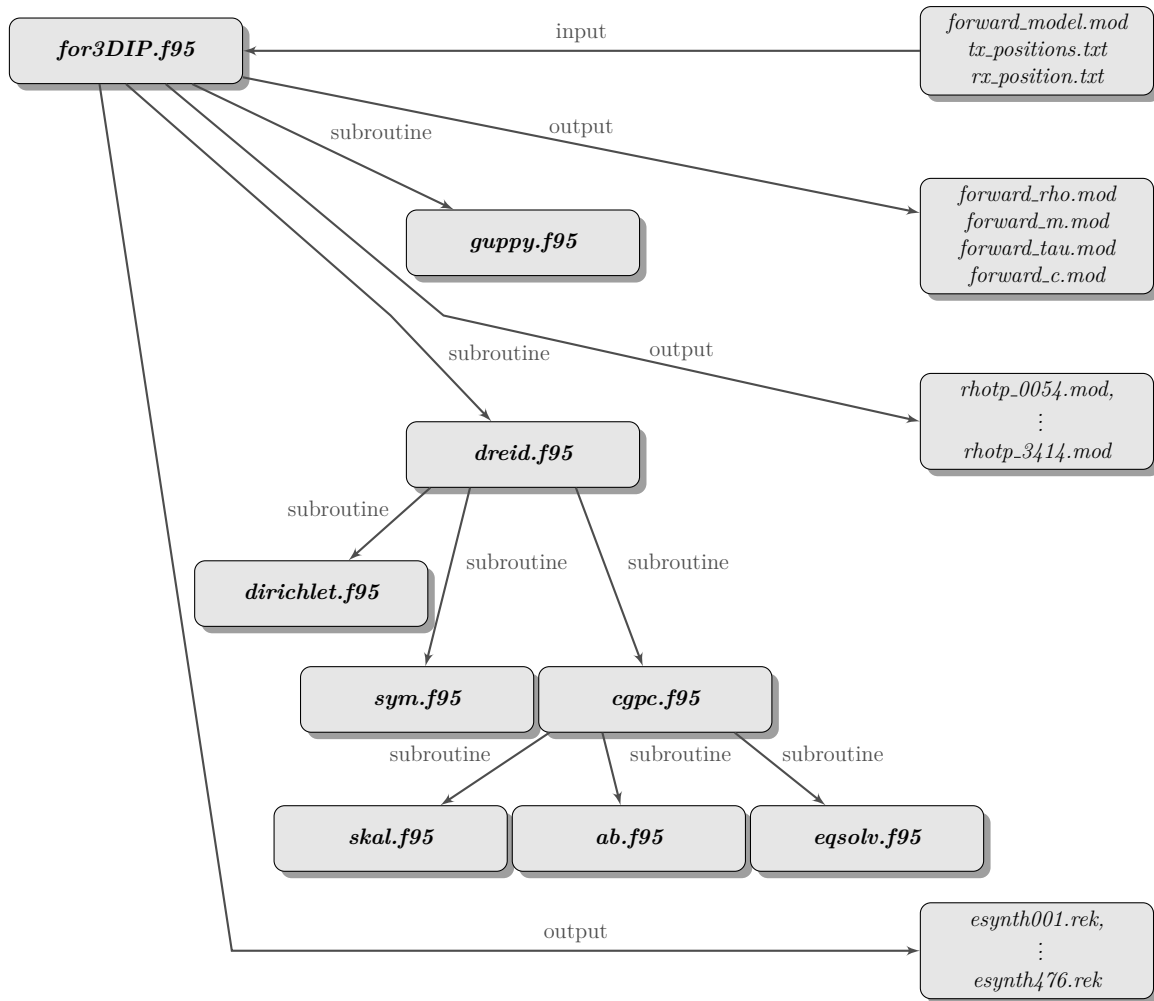


Abbildung D.1.: Aufbau des Programms For3DIP

writing forwardmodel for rho, m, tau and c für die Parameter Widerstand ρ , Auf-
ladbarkeit m , Relaxationszeit τ und Frequenzexponent c wird das Vorwärtsmodell
(*forward_rho.mod*, *forward_m.mod*, *forward_tau.mod* und *forward_c.mod*) rausge-
schrieben

Calculating a resistivity model for each time point

using guppy.f95 to calculate a transient for each cell Die Subroutine *guppy.f95*
wird für jede Zelle aufgerufen und der zeitabhängige Widerstand berechnet

write rhotp_*.mod for each time point Für jeden Zeitpunkt wird
das zeitabhängige Widerstandsmodell des Untergrundes herausgeschrieben
(*rhotp_*.mod*).

forward calculation for each time point

reading tx and rx positions Die Sender- und Empfängerpositionen werden eingelesen (*tx_positions.txt*, *rx_positions.txt*).

loop over timepoints Die Schleife über alle Zeitpunkte beginnt und die zeitabhängige Leitfähigkeit σ [Ωm] jeder Zelle wird unabhängig von denen anderer Zeitpunkten berechnet (Hördt et al., 2006).

forward calculation for each transmitter using dreid.f95 Für jede Senderposition wird die Subroutine *dreid.f95* aufgerufen und das Potential \mathbf{V} jeder Zelle berechnet. Das Potential an der Oberfläche wird für jede Senderposition gespeichert. Dieser Abschnitt kann mittels der Variable `num_threads` parallel auf mehreren Kernen laufen (`num_threads` \leq Anzahl der Senderpositionen) .

calculation of the synthetic data-set Für jede Empfängerkombination rx_{ij} wird die Potentialdifferenz ΔV für jeden Zeitpunkt t berechnet

write out transient for each electrodecombination Für jede Sender-Empfänger-Kombination wird der Transient im Output-File *esynt*.rek* rausgeschrieben.

D.3. Aufbau der einzelnen Subroutinen

Im Folgenden wird die genaue Umsetzung des in 3.1.4 erläuterten Vorgehens innerhalb der verwendeten Subroutinen beschrieben.

D.3.1. Subroutine *guppy.f95*

Input / Output

Input Widerstand, Aufladbarkeit, Relaxationszeit, Frequenzexponent, Anzahl der Zeitpunkte

Output zeitabhängiger Widerstand

Aufbau

abscissae values Abszissenwerte werden nach Guptasarma (1982) festgelegt

filter coefficients Filterkoeffizienten werden festgelegt

loop of times Beginn der Schleife über alle Zeitpunkte [ms]

loop of frequencies Kreisfrequenzen werden berechnet nach 3.3

kernel function Berechnung des frequenzabhängigen Widerstands der jeweiligen Frequenz nach 3.1

output voltage Berechnung des zeitabhängigen Widerstandes des jeweiligen Zeitpunkts nach 3.2

D.3.2. Subroutine *dreid.f95*

nach Spitzer (1995)

Input / Output

Input aktuelle Senderpositionen, Koordinaten der Gitterpunkte in x-, y- und z-Richtung, Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung, die zeitabhängige Leitfähigkeit jeder Zelle und die Nummer des aktuellen Senders

Output Potential aller Zellen für die aktuelle Senderposition und den aktuellen Zeitpunkt

Aufbau

calculation of cell resistivities sigma for grid cells along the outer boundaries Leitfähigkeiten der äussersten Zellen werden gleich denen der benachbarten Zellen gesetzt

calculation of grid spacings in x-direction (f(i)), y-direction (g(j)) and z-direction (h(k)) Die Gitterzellenabmessungen in x-, y- und z-Richtung werden berechnet

calculation of x(0), x(im+1), y(0), y(jm+1), z(0) and z(km+1) Koordinaten der Randzellen werden berechnet

calculation of the auxiliary values s(i,j,k) for each grid cell volumen-gewichtete Zellenleitfähigkeiten werden berechnet

calculation of the conductivities at the nodes Berechnung der Leitfähigkeiten an den Gitterpunkten mit dem arithmetisches Mittel der acht angrenzenden volumen-gewichteten Zellenleitfähigkeiten.

calculation of the conductivity gradients at the nodes Berechnung der Leitfähigkeitsgradienten an den Gitterpunkten

calculation of the coefficients Berechnung der Kopplungskoeffizienten und des Selbstkopplungskoeffizienten

calculation of the source terms Berechnung des Quellterms und speichern der Quellterme in einer Matrix.

neumann boundary conditions at the surface ($k=1$) Die Kopplungskoeffizienten an der Erde-Luft-Grenze werden nach der Neumann-Bedingung gesetzt

dirichlet boundary conditions at all other boundaries Die Subroutine *dirichlet.f95* wird aufgerufen und die Kopplungskoeffizienten der anderen Gittergrenzen werden nach der Dirichlet-Bedingung gleich null gesetzt

renumbering of b and c die Kopplungskoeffizienten und Quellterme (Matrix) werden als Vektoren gespeichert

determination of the positioning vectors for compact storage Festlegen der Positionsvektoren zum kompakten Speichern der Kopplungskoeffizientenmatrix, welche nur aus sieben nicht-leeren Diagonalen besteht. Bei der späteren Berechnungen kann so gezielt auf die von null verschiedenen Einträge zugegriffen werden.

symmetrization of the coefficient matrix and solving the linear set of equations by a preconditioned method of conjugate gradients according to schwarz Die Subroutine *sym.f95* wird aufgerufen und die Kopplungskoeffizientenmatrix symmetrisiert. Die Subroutine *cgpc.f95* wird aufgerufen und das lineare Gleichungssystem $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ gelöst. Hierbei ist \mathbf{A} die Kopplungskoeffizientenmatrix, \mathbf{x} der Potentialvektor und \mathbf{b} Quelltermvektor.

conversion from the potentials stored in the vector vnum into the array vm Der Potentialvektor \mathbf{x} wird als Matrix abgespeichert.

D.3.3. Subroutine *dirichlet.f95*

Nach Spitzer (1995) werden die Kopplungskoeffizienten der Gittergrenzen, welche nicht die Erde-Luft-Grenze sind, nach der Dirichlet-Bedingung ($V = 0$) gleich null gesetzt.

Input / Output

Input Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung

Output Kopplungskoeffizienten der Grenzflächen

Aufbau

boundary y back (j=1) Die Kopplungskoeffizienten für $y = \infty$ werden gleich null gesetzt

boundary x left (i=1) Die Kopplungskoeffizienten für $x = \infty$ werden gleich null gesetzt

boundary z down (k=km) Die Kopplungskoeffizienten für $z = -\infty$ werden gleich null gesetzt

boundary y front (j=jm) Die Kopplungskoeffizienten für $y = -\infty$ werden gleich null gesetzt

boundary x right (i=im) Die Kopplungskoeffizienten für $x = -\infty$ werden gleich null gesetzt

D.3.4. Subroutine *sym.f95*

Nach Spitzer (1995) werden die Matrix der Kopplungskoeffizienten **A** und der Quellterme **b** symmetrisiert und skaliert. Beide Seiten der Gleichung (3.32) werden mit der Transformationsmatrix **K** multipliziert

$$symfakt = \begin{pmatrix} symfakt_1 & 0 \\ \ddots & \\ 0 & symfakt_{imjmkm} \end{pmatrix},$$
 so dass man ein äquivalentes Set an Gleichungen (3.33) erhält.

Input / Output

Input Kopplungskoeffizienten (Vektor), Quellterme aller Zellen (Vektor) und Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung

Output Kopplungskoeffizienten (Vektor) und Quellterme aller Zellen (Vektor)

Aufbau

symmetrizing the rows 2 to im Symmetrisierung der Zeilen

$$symfakt_{\mu} = c2(\mu - 1)/c1(\mu) \quad \mu = 2, \dots, im \quad (D.1)$$

$$c0num(i) = c0num(i) * symfakt_i \quad (D.2)$$

\vdots

$$c6num(i) = c6num(i) * symfakt_i \quad (D.3)$$

$$bnum(i) = bnum(i) * symfakt_i \quad (D.4)$$

symmetrizing the rows im+1 to im*jm Symmetrisierung der Zeilen

$$symfakt_{\mu} = c4(\mu - im)/c3(\mu) \quad \mu = im, \dots, im * jm \quad (D.5)$$

symmetrizing the rows im*jm+1 to im*jm*km Symmetrisierung der Zeilen

$$symfakt_{\mu} = c6(\mu - im * jm + 1)/c5(\mu) \quad \mu = im * jm + 1, \dots, im * jm * km \quad (D.6)$$

D.3.5. Subroutine *cgpc.f95*

Nach Spitzer (1995) wird lineare Gleichungssystem $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ gelöst. Hierbei ist \mathbf{A} die Kopplungskoeffizientenmatrix, \mathbf{x} der Potentialvektor und \mathbf{b} der Quelltermvektor.

Zum Lösen des Gleichungssystems wird die **preconditioned conjugate gradient method (CGPC)** genutzt. Es wird eine **symmetric successiv overrelaxtion (SSOR)** durchgeführt.

Schwarz, H. R., 1991, Methode der finiten Elemente, Teubner Stuttgart

Die symmetrische, skalierte Kopplungskoeffizientenmatrix \mathbf{A} kann als Summe einer unteren Dreiecksmatrix \mathbf{E} , einer oberen Dreiecksmatrix $\mathbf{F} = \mathbf{E}^T$ und einer Einheitsmatrix \mathbf{I} geschrieben werden

$$\mathbf{A} = \mathbf{E} + \mathbf{I} + \mathbf{F} \quad (D.7)$$

Die Vorkonditionierungsmatrix \mathbf{M} wird mittels der Matrix \mathbf{C} berechnet, welche sich

aus den von null verschiedenen Einträgen des unteren Dreiecks von \mathbf{A} zusammensetzt. ϖ bezeichnet einen Relaxationsfaktor und ist Element der reellen Zahlen.

$$\mathbf{M} = \mathbf{C}\mathbf{C}^T \quad (\text{D.8})$$

$$= (\mathbf{I} + \varpi\mathbf{E})(\mathbf{I} + \varpi\mathbf{F}) \quad (\text{D.9})$$

Für den Potentialvektor \mathbf{x} wird ein Startvektor angenommen und dieser iterativ angepasst.

Input / Output

Input Kopplungskoeffizienten (Vektor), Positionsvektoren zum kompakten Speichern, Quellterme aller Zellen (Vektor), Potential aller Zellen für die aktuelle Senderposition (Vektor), Anzahl aller Zellen im Gitter und Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung

Output Potential aller Zellen für die aktuelle Senderposition (Vektor)

Aufbau

determination of omega Relaxationsfaktor wird gleich 1,4 gesetzt

scaling of the coefficient matrix by weighting by c0num die Subroutine *skal.f95* wird aufgerufen und die Koeffizientenmatrix mit dem Selbstkopplungskoeffizienten skaliert.

first step of the iteration die Subroutine *ab.f95* wird aufgerufen und die Koeffizientenmatrix mit dem Potentialvektor multipliziert.

Das Startresidual \mathbf{r}_k wird berechnet $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ und die Suchrichtung \mathbf{p}_k wird für die erste iteration gleich null gesetzt $\mathbf{p}_{-1} = 0$. Der Gradient der Suchrichtung ϱ wird für die -1. Iteration gleich Eins gesetzt $\varrho_{-1} = 1$

begin iteration loop Der Gradient der Suchrichtung ϱ_k wird zu Begin jeder Iteration gleich des Residuals der aktuellen Iteration \mathbf{r}_{k+1} gesetzt.

Die Subroutine *eqsolv.f95* wird aufgerufen und das Gleichungssystem $\mathbf{M}\varrho_k = \mathbf{r}_k$ mittels der Gauss Methode für ϱ_k gelöst.

Der Gradient der Suchrichtung \mathbf{q}_k wird mit dem transponierten Residual \mathbf{r}_k multipliziert $\mathbf{q}_k = \mathbf{r}_k^T \mathbf{p}_k$. Das Verhältnis des Gradienten der aktuellen und der vorherigen Iteration β_k wird gebildet

$$\beta_k = \frac{\mathbf{q}_k}{\mathbf{q}_{k-1}}. \quad (\text{D.10})$$

Die aktuelle Suchrichtung \mathbf{p}_k wird berechnet

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{q}_k + \beta_k \mathbf{p}_{k-1}. \quad (\text{D.11})$$

Die Subroutine **ab.f95** wird aufgerufen und die Koeffizientenmatrix mit dem Suchrichtungsvektor multipliziert $\mathbf{A}\mathbf{p}_k$.

Der neue Residualvektor \mathbf{r}_{k+1} und der neue Potentialvektor \mathbf{x}_{k+1} werden mit den Hilfsvariablen $\sigma_k = \mathbf{p}_k^T \mathbf{A}\mathbf{p}_k$ und $\alpha_k = \frac{\mathbf{q}_k}{\sigma_k}$ berechnet:

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{p}_k \quad (\text{D.12})$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k \quad (\text{D.13})$$

Die Variablen werden für die nächste Iteration übergeben.

stopping criterion Das Gesamtresidual $|\mathbf{r}|$ wird berechnet $|\mathbf{r}| = \sqrt{\sum_{i=1}^{imjmk m} \mathbf{r}_{k+1}(i)}$. Fällt das Gesamtresidual unter einen festgelegten Grenzwert (z.B. 1×10^{-10}) wird die Berechnung des Potentialvektor \mathbf{x}_k abgebrochen.

rescaling Der Potentialvektor \mathbf{x} wird aus äquivalenz Gründen mit dem Skalierungsfaktor \mathbf{d} multipliziert

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}\mathbf{d} \quad (\text{D.14})$$

D.3.6. Subroutine **skal.f95**

Die Koeffizientenmatrix wird mit dem Selbstkopplungskoeffizienten nach Spitzer (1995) skaliert.

$$\tilde{A}_{\mu\nu} = d_\mu A_{\mu\nu} d_\nu \quad (\text{D.15})$$

Dabei ist $d_\mu = 1/\sqrt{A_{\mu\mu}}$. Auch b_μ wird mit d_μ multipliziert und um die Äquivalenz zu erhalten wird x_ν mit d_ν multipliziert nachdem das Gleichungssystem gelöst wurde.

Input / Output

Input Kopplungskoeffizienten (Vektor, Positionsvektoren zum kompakten Speichern, Quellterme aller Zellen (Vektor), Anzahl aller Zellen im Gitter, Skalierungsfaktor und Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung

Output Kopplungskoeffizienten (Vektor), Quellterme aller Zellen (Vektor) und Skalierungsfaktor

Aufbau

scaling of all non zero elements by weighting by c0num Der Skalierungsfaktor wird berechnet und die Kopplungskoeffizienten und der Quelltermvektor werden skaliert.

$$d_\mu = \frac{1}{\sqrt{-c0num(\mu)}} \quad (D.16)$$

$$bnum_\mu = -d(\mu)bnum(\mu) \quad (D.17)$$

$$c0num_\mu = -d(\mu)c0num(\mu)d(iposc0(\mu)) \quad (D.18)$$

$$\vdots \quad (D.19)$$

$$c6num_\mu = -d(\mu)c6num(\mu)d(iposc6(\mu)) \quad (D.20)$$

D.3.7. Subroutine *ab.f95*

Die Kopplungskoeffizientenmatrix **A** wird mit Potentialvektor **x** nach Spitzer (1995) multipliziert.

Input / Output

Input Kopplungskoeffizienten (Vektor), Positionsvektoren zum kompakten Speichern, Potential aller Zellen (Vektor) (erster Aufruf) / Suchrichtung aller Zellen (Vektor) (zweiter Aufruf), Produkt der Multiplikation von Kopplungskoeffizienten und Potential (erster Aufruf) / Produkt der Multiplikation von Kopplungskoeffizienten und Suchrichtung (zweiter Aufruf), Anzahl aller Zellen im Gitter und Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung

$$amax = \mathbf{Ax} \quad (D.21)$$

Output Produkt der Multiplikation von Kopplungskoeffizientenmatrix und Potentialvektor (erster Aufruf) / Produkt der Multiplikation von Kopplungskoeffizienten und Suchrichtung (zweiter Aufruf)

Aufbau

multiplication of the matrix a by the vector x Die Kopplungskoeffizientenmatrix wird mit Potentialvektor multipliziert.

$$\begin{aligned} almax_i = & c5num(i) * vnum(iposc5(i)) + c3num(i) * vnum(iposc3(i)) \\ & + c1num(i) * vnum(iposc1(i)) + c0num(i) * vnum(iposc0(i)) \\ & + c2num(i) * vnum(iposc2(i)) + c4num(i) * vnum(iposc4(i)) \\ & + c6num(i) * vnum(iposc6(i)) \end{aligned} \quad (D.22)$$

D.3.8. Subroutine *eqsolv.f95*

Das Gleichungssystem $\mathbf{M}\boldsymbol{\rho}_k = \mathbf{r}_k$ wird mittels der Gauss Methode nach Spitzer (1995) gelöst. Aufgrund der speziellen Form der Prekonditionierungsmatrix \mathbf{M} (Produkt einer Unteren- und Oberendreiecksmatrix) kann die Vorwärts- und Rückwärtssubstitution der Gauss Methode besonders einfach erfolgen.

Input / Output

Input Kopplungskoeffizienten (Vektor), Positionsvektoren zum kompakten Speichern, Residual, Anzahl aller Zellen im Gitter, Relaxationsfaktor und Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung

Output Gradient der Suchrichtung

Aufbau

forward substitution Die Vorwärtssubstitution erfolgt grundsätzlich in folgender Form (i=2,n):

$$\boldsymbol{\rho}_k(i) = \frac{1}{m(i,i)} \left(\mathbf{r}_k(i) - \sum_{j=1}^{i-1} m(i,j) \boldsymbol{\rho}_k(j) \right). \quad (D.23)$$

Aufgrund der speziellen Form der Prekonditionierungsmatrix \mathbf{M} kann die Vorwärtssubstitution einfach erfolgen.

$$sum = \omega (c1(i) \cdot r(iposc1(i)) + c3(i) \cdot r(iposc3(i)) + c5(i) \cdot r(iposc5(i))) \quad (D.24)$$

$$r(i) = (r(i) - sum) \quad (D.25)$$

backward substitution Die Rücksubstitution erfolgt grundsätzlich in folgender Form (i=n-1,-1):

$$\rho_k(i) = \frac{1}{m(i,i)} \left(r_k(i) - \sum_{j=i+1}^n m(i,j) \rho_k(j) \right). \quad (D.26)$$

Aufgrund der speziellen Form der Prekonditionierungsmatrix \mathbf{M} kann die Rücksubstitution einfach erfolgen.

$$sum = \omega (c2(i) \cdot r(iposc2(i)) + c4(i) \cdot r(iposc4(i)) + c6(i) \cdot r(iposc6(i))) \quad (D.27)$$

$$r(i) = (r(i) - sum) \quad (D.28)$$

D.4. Input- und Output-Dateien

Der Aufbau und der Inhalt der verwendeten und erzeugten Dateien werden im Folgenden grundsätzlich und an einem Beispiel erläutert.

D.4.1. *forward_model.mod* Untergrundmodell

Enthält

- Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung
- Koordinaten der Eckpunkte der Gitterzellen
- Anzahl der Modellblöcke (inkl. dem Hintergrundblock)
- Eckpunkte der Blöcke (inkl. des Hintergrundes, welcher immer als erstes stehen muss und das gesamte Gitter umfassen muss)
- Werte für Widerstand, Aufladbarkeit, Relaxationszeit und Frequenzexponent jedes Blocks
- Anzahl der Senderpositionen und der Empfänger pro Sender
- Anzahl der Zeitpunkte

Beispiel mit einem Block:

Hintergrund (muss immer zu erst stehen und das gesamte Gitter abdecken): von -130,36 m bis 130,36 m in x-Richtung, von -77,03 m bis 77,03 m in y-Richtung, von 0 m bis 196,16 m in z-Richtung, $\rho = 100,00 \Omega m$, $m = \tau = c = 0$

1. Block: von -5,00 m bis 5,00 m in x-Richtung, von -5 m bis 5 m in y-Richtung, von 2,60 m bis 6,37 m in z-Richtung, $\rho = 10,00 \Omega m$, $m = 1,00$, $\tau = 0.5$, $c = 0.25$

forward_model.mod

```

95 27 24 (Anzahl der Zellen in x-, y-, z - Richtung )
-130.36 -97.77 -73.33 -55.00 -53.75 -52.50 -51.25 -50.00 -48.75 -47.50
-46.25 -45.00 -43.75 -42.50 -41.25 -40.00 -38.75 -37.50 -36.25 -35.00
-33.75 -32.50 -31.25 -30.00 -28.75 -27.50 -26.25 -25.00 -23.75 -22.50
-21.25 -20.00 -18.75 -17.50 -16.25 -15.00 -13.75 -12.50 -11.25 -10.00
-8.75 -7.50 -6.25 -5.00 -3.75 -2.50 -1.25 0.00 1.25 2.50
3.75 5.00 6.25 7.50 8.75 10.00 11.25 12.50 13.75 15.00
16.25 17.50 18.75 20.00 21.25 22.50 23.75 25.00 26.25 27.50
28.75 30.00 31.25 32.50 33.75 35.00 36.25 37.50 38.75 40.00
41.25 42.50 43.75 45.00 46.25 47.50 48.75 50.00 51.25 52.50
53.75 55.00 73.33 97.77 130.36 (x - Gitterkoordinaten)
-77.03 -53.33 -36.67 -25.00 -22.50 -20.00 -17.50 -15.00 -12.50 -10.00
-7.50 -5.00 -2.50 0.00 2.50 5.00 7.50 10.00 12.50 15.00
17.50 20.00 22.50 25.00 36.67 53.33 77.03 (y - Gitterkoordinaten)
0.42 1.02 1.74 2.60 3.64 4.88 6.37 8.17 10.32 12.90
15.99 19.71 24.16 29.51 35.93 43.64 52.88 63.98 77.29 93.26
112.43 135.43 163.04 196.16 (z - Gitterpunktkoordinaten)
2 (Anzahl der Modellblöcke )
1 95 1 27 1 24 (x-, y-, z - Eckgitterpunkte des Hintergrundes)
44 52 12 16 4 7 (x-, y-, z - Eckgitterpunkte des 1. Blocks )
100.000000 0.000000 0.000000 0.000000 (rho,m,tau, c des Hintergrundes)
10.000000 1.000000 0.500000 0.250000 (rho,m,tau, c des 1. Blocks)
68 7 (Anzahl der Senderpositionen und Empfänger pro Sender)
27 (Anzahl der Zeitpunkte)

```

D.4.2. *tx_positions.txt* Empfängerpositionen

siehe E.4.2

D.4.3. *rx_positions.txt* Empfängerpositionen

siehe E.4.5

D.4.4. *forward_rho.mod* Untergrundmodell des Widerstands**Enthält**

- Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung
- Koordinaten der Eckpunkte der Gitterzellen

- Werte für Widerstand jeder Zelle

Beispiel mit einem Block:

Hintergrund: von -130,36 m bis 130,36 m in x-Richtung, von -77,03 m bis 77,03 m in y-Richtung, von 0 m bis 196,16 m in z-Richtung, $\rho = 100,00 \Omega m$

1. Block: von -5,00 m bis 5,00 m in x-Richtung, von -2,50 m bis 2,50 m in y-Richtung, von 2,60 m bis 6,37 m in z-Richtung, $\rho = 10,00 \text{ } \Omega m$

forward_rho.mod

95	27	24	(Anzahl der Zellen in x-, y-, z - Richtung)						
-130.36	-97.77	-73.33	-55.00	-53.75	-52.50	-51.25	-50.00	-48.75	-47.50
-46.25	-45.00	-43.75	-42.50	-41.25	-40.00	-38.75	-37.50	-36.25	-35.00
-33.75	-32.50	-31.25	-30.00	-28.75	-27.50	-26.25	-25.00	-23.75	-22.50
-21.25	-20.00	-18.75	-17.50	-16.25	-15.00	-13.75	-12.50	-11.25	-10.00
-8.75	-7.50	-6.25	-5.00	-3.75	-2.50	-1.25	0.00	1.25	2.50
3.75	5.00	6.25	7.50	8.75	10.00	11.25	12.50	13.75	15.00
16.25	17.50	18.75	20.00	21.25	22.50	23.75	25.00	26.25	27.50
28.75	30.00	31.25	32.50	33.75	35.00	36.25	37.50	38.75	40.00
41.25	42.50	43.75	45.00	46.25	47.50	48.75	50.00	51.25	52.50
53.75	55.00	73.33	97.77	130.36	(x - Gitterkoordinaten)				
-77.03	-53.33	-36.67	-25.00	-22.50	-20.00	-17.50	-15.00	-12.50	-10.00
-7.50	-5.00	-2.50	0.00	2.50	5.00	7.50	10.00	12.50	15.00
17.50	20.00	22.50	25.00	36.67	53.33	77.03	(y - Gitterkoordinaten)		
0.42	1.02	1.74	2.60	3.64	4.88	6.37	8.17	10.32	12.90
15.99	19.71	24.16	29.51	35.93	43.64	52.88	63.98	77.29	93.26
112.43	135.43	163.04	196.16	(z - Gitterpunktkoordinaten)					
100.000000	100.000000	... insgesamt 94 (x-1) mal ... 100.000000							
100.000000	100.000000	... insgesamt 94 (x-1) mal ... 100.000000							
		:							
		insgesamt 23 (z-1) mal							:
		:							
100.000000	100.000000	... insgesamt 94 (x-1) mal ... 100.000000							
		:							
100.000000	100.000000	... insgesamt 94 (x-1) mal ... 100.000000							

D.4.5. *forward_m.mod* Untergrundmodell des Aufladbarkeit

Enthält

- Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung
- Koordinaten der Eckpunkte der Gitterzellen
- Werte für Aufladbarkeit jeder Zelle

siehe auch *forward_rho.mod*

D.4.6. *forward_tau.mod* Untergrundmodell der Relaxationszeit**Enthält**

- Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung
- Koordinaten der Eckpunkte der Gitterzellen
- Werte für die Relaxationszeit jeder Zelle

siehe auch *forward_rho.mod*

D.4.7. *forward_c.mod* Untergrundmodell des Frequenzexponenten**Enthält**

- Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung
- Koordinaten der Eckpunkte der Gitterzellen
- Werte für den Frequenzexponent jeder Zelle

siehe auch *forward_rho.mod*

D.4.8. *rhothp_0054.mod*, ..., *rhothp_3414.mod* Untergrundmodell des**zeitabhängigen Widerstandes****Enthält**

- Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung
- Koordinaten der Eckpunkte der Gitterzellen
- Werte für zeitabhängigen Widerstand jeder Zelle

rhothp_0054.mod

```

95 27 24 (Anzahl der Zellen in x-, y-, z-Richtung)
-130.36 -97.77 -73.33 -55.00 -53.75 -52.50 -51.25 -50.00 -48.75 -47.50
-46.25 -45.00 -43.75 -42.50 -41.25 -40.00 -38.75 -37.50 -36.25 -35.00
-33.75 -32.50 -31.25 -30.00 -28.75 -27.50 -26.25 -25.00 -23.75 -22.50
-21.25 -20.00 -18.75 -17.50 -16.25 -15.00 -13.75 -12.50 -11.25 -10.00
-8.75 -7.50 -6.25 -5.00 -3.75 -2.50 -1.25 0.00 1.25 2.50
3.75 5.00 6.25 7.50 8.75 10.00 11.25 12.50 13.75 15.00
16.25 17.50 18.75 20.00 21.25 22.50 23.75 25.00 26.25 27.50
28.75 30.00 31.25 32.50 33.75 35.00 36.25 37.50 38.75 40.00

```

D.4.9. *esynth001.rek*, ... , *esynth476.rek* Transienten der Elektrodenkombinationen

- Header (enthält keinen relevanten Inhalt)
- Anzahl der Zeitpunkte im Output-File
- Zeitpunkte [ms,s], Potentialdifferenz des jeweiligen Zeitpunkts [V] und Fehler der Potentialdifferenz [V]

148

47 Anzahl der Zeitpunkte im Output-File

P

Zeitpunkt [ms]	Zeitpunkt [s]	Potentialdifferenz [V]	Fehler der Potentialdifferenz [V]
1 0.1000E-02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
2 0.2000E-02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
⋮			
39 0.3981E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
46 0.4642E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
54 0.5412E+02	0.1265E+01	0.1265E+01	0.0001E+00
63 0.6310E+02	0.1265E+01	0.1265E+01	0.0001E+00
⋮			
2928 0.2929E+04	0.1265E+01	0.1265E+01	0.0001E+00
3414 0.3415E+04	0.1265E+01	0.1265E+01	0.0001E+00

} Platzhalter für nicht berechnete Zeitpunkte

} berechnete Zeitpunkte

D.5. Variablen

Die verwendeten Variablen der einzelnen Routinen, ihre Bedeutung und das verwendete Format werden in diesem Abschnitt aufgelistet.

D.5.1. *for3DIP.f95*

Tabelle D.1.: Variablen der Routine *for3DIP.f95*

Name	Bedeutung	Format
blco	Nummer des Eckgitterpunktes in x-, y-, z-Richtung der Blöcke	i4
blnr	Anzahl der verwendeten Blöcke im Modell	i4
blpa	Widerstand, Aufladbarkeit, Relaxationszeit und Frequenzexponent jedes Blocks	f14.6
eleccomb	Name der aktuellen Elektrodenkombination	a
esynth	Potentialdifferenz	f
i	Laufvariable	i4
ico1, ico2	aktuelle Empfängerposition	i
iep	Laufvariable	i
im	Anzahl der Zellen in x-Richtung	i4
iq1, iq2	aktuelle Senderpositionen	i
j	Laufvariable	i4
jm	Anzahl der Zellen in y-Richtung	i4
k	Laufvariable	i4
km	Anzahl der Zellen in z-Richtung	i4
kfac	Geometriefaktor	f
l	Laufvariable	i
m	Laufvariable	i
n	Laufvariable	i
nt	Anzahl der Zeitpunkte	i4
numre	Empfänger pro Sender	i4
numspr	Anzahl der Senderpositionen	i4
para	Widerstand, Aufladbarkeit, Relaxationszeit und Frequenzexponent jeder Zelle	f
rhotp	zeitabhängiger Widerstand jeder Zelle	f
rxpos	Empfängerpositionen	i
sigma	zeitabhängige Leitfähigkeit jeder Zelle	f
timepoint	Name des aktuellen Zeitpunkts	a
tp	Laufvariable	i

txpos	Senderpositionen	i
vm	Potential aller Zellen für die aktuelle Senderposition	f
vsurf	Potential an der Oberfläche für jede Senderposition	f
x	Koordinaten der Gitterpunkte in x-Richtung	f9.2
y	Koordinaten der Gitterpunkte in y-Richtung	f9.2
z	Koordinaten der Gitterpunkte in z-Richtung	f9.2

D.5.2. *guppy.f95*

Tabelle D.2.: Variablen der Routine *guppy.f95*

Name	Bedeutung	Format
ar	Abszissenwert	f
c	Frequenzexponent	f
cha	Aufladbarkeit	f
filt	Filterkoeffizient	f
h	Kernel Funktion	c
i	Laufvariable	i
it	Zeitpunkt in ms	i
nf	Anzahl der Frequenzen (=21)	i
nt	Anzahl der Zeitpunkte	i
r	Widerstand	f
rhos	zeitabhängiger Widerstand	f
tau	Relaxationszeit	f

D.5.3. *dreid.f95*

Tabelle D.3.: Variablen der Routine *dreid.f95*

Name	Bedeutung	Format
b	Quellterme aller Zellen (Matrix)	f
bnum	Quellterme aller Zellen (Vektor)	f
c0-c6	Kopplungskoeffizienten (Matrix)	f
c0num-c6num	Kopplungskoeffizienten (Vektor)	f
dsigdx,dsigdy,dsigdz	Leitfähigkeitsgradienten in x-,y- und z-Richtung	f
f	Gitterzellenabmessungen in x-Richtung	f
g	Gitterzellenabmessungen in y-Richtung	f
h	Gitterzellenabmessungen in z-Richtung	f
i	Laufvariable	i
iposc0-iposc6	Positionsvektoren zum kompakten Speichern	i
iq1, iq2	aktuelle Senderpositionen	i
im	Anzahl der Zellen in x-Richtung	i4
imjmk	Anzahl aller Zellen des Gitters	i
j	Laufvariable	i
jm	Anzahl der Zellen in y-Richtung	i4
k	Laufvariable	i
km	Anzahl der Zellen in z-Richtung	i4
m	Nummer der aktuellen Senderposition	i
q1,q2	Quellterme	f
s	Volumen-gewichtete Zelleitfähigkeit	f
sigma	zeitabhängige Leitfähigkeit jeder Zelle	f
sigman	zeitabhängige Leitfähigkeit der Gitterpunkte	f
term	Gesamtvolumen der angrenzenden Zellen eines Gitterpunktes	f
vm	Potential aller Zellen für die aktuelle Senderposition (Matrix)	f
vnum	Potential aller Zellen für die aktuelle Senderposition (Vektor)	f

x	Koordinaten der Gitterpunkte in x-Richtung	f9.2
y	Koordinaten der Gitterpunkte in y-Richtung	f9.2
z	Koordinaten der Gitterpunkte in z-Richtung	f9.2

D.5.4. *dirichlet.f95*

Tabelle D.4.: Variablen der Routine *dirichlet.f95*

Name	Bedeutung	Format
c1-c4,c6	Kopplungskoeffizienten	f
im	Anzahl der Zellen in x-Richtung	i4
jm	Anzahl der Zellen in y-Richtung	i4
km	Anzahl der Zellen in z-Richtung	i4

D.5.5. *sym.f95*

Tabelle D.5.: Variablen der Routine *sym.f95*

Name	Bedeutung	Format
bnum	Quellterme aller Zellen (Vektor)	f
c0num-c6num	Kopplungskoeffizienten (Vektor)	f
i	Laufvariable	i
im	Anzahl der Zellen in x-Richtung	i4
jm	Anzahl der Zellen in y-Richtung	i4
km	Anzahl der Zellen in z-Richtung	i4
symfakt	Symmetriefaktor	f

D.5.6. *cgpc.f95*

Tabelle D.6.: Variablen der Routine *cgpc.f95*

Name	Bedeutung	Format
alphan	Hilfsvariable	f
amax	Produkt der Multiplikation von Kopplungskoeffizienten und Potential	f
amalp	Produkt der Multiplikation von Kopplungskoeffizienten und Suchrichtung	f
betan	Verhältnis der Gradienten der Suchrichtung der aktuellen und vorherigen Iteration	f
bnum	Quellterme aller Zellen (Vektor)	f
c0num-c6num	Kopplungskoeffizienten (Vektor)	f
im	Anzahl der Zellen in x-Richtung	i4
imjmk	Anzahl aller Zellen des Gitters	i
iposc0-iposc6	Positionsvektoren zum kompakten Speichern	i
jm	Anzahl der Zellen in y-Richtung	i4
km	Anzahl der Zellen in z-Richtung	i4
omega	Relaxationsfaktor	f
pn	Suchrichtung	f
pnm1	Suchrichtung der vorherigen Iteration	f
rhonm1	Gradient der Suchrichtung der vorherigen Iteration	f
rhon	Gradient der Suchrichtung	f
rn	Residual vom Quellterm zum Produkt Kopplungskoeffizientenmatrix und Potentialvektor	f
rnpl	Residualvektor der folgenden Iteration	f
rnplabs	Gesamtresidual	f

ron	Gradient der Suchrichtung	f
sigman	Hilfsvariable	f
vnum	Potential aller Zellen (Vektor)	f
vnumpl	Potential aller Zellen der nächsten Iteration (Vektor)	f

D.5.7. *skal.f95*

Tabelle D.7.: Variablen der Routine *skal.f95*

Name	Bedeutung	Format
bnum	Quellterme aller Zellen (Vektor)	f
c0num-c6num	Kopplungskoeffizienten (Vektor)	f
d	Skalierungsfaktor	f
im	Anzahl der Zellen in x-Richtung	i4
imjkm	Anzahl aller Zellen des Gitters	i
iposc0-iposc6	Positionsvektoren zum kompakten Speichern	i
jm	Anzahl der Zellen in y-Richtung	i4
km	Anzahl der Zellen in z-Richtung	i4

D.5.8. *ab.f95*

Tabelle D.8.: Variablen der Routine *ab.f95*

Name	Bedeutung	Format
almax	Produkt der Multiplikation von Kopplungskoeffizienten und Potential (erster Aufruf) / von Kopplungskoeffizienten und Suchrichtung (zweiter Aufruf)	f
c0num-c6num	Kopplungskoeffizienten (Vektor)	f
i	Laufvariable	i
im	Anzahl der Zellen in x-Richtung	i4
imjkm	Anzahl aller Zellen des Gitters	i
iposc0-iposc6	Positionsvektoren zum kompakten Speichern	i
jm	Anzahl der Zellen in y-Richtung	i4
km	Anzahl der Zellen in z-Richtung	i4
vnum	Potential (Vektor) (erster Aufruf) / Suchrichtung (Vektor) (zweiter Aufruf)	f

D.5.9. *eqsolv.f95*

Tabelle D.9.: Variablen der Routine *eqsolv.f95*

Name	Bedeutung	Format
c1num-c6num	Kopplungskoeffizienten (Vektor)	f
i	Laufvariable	i
im	Anzahl der Zellen in x-Richtung	i4
imjkm	Anzahl aller Zellen des Gitters	i
iposc1-iposc6	Positionsvektoren zum kompakten Speichern	i
jm	Anzahl der Zellen in y-Richtung	i4
km	Anzahl der Zellen in z-Richtung	i4
omega	Relaxationsfaktor	f
rn	Residual vom Quellterm zum Produkt Kopplungskoeffizientenmatrix und Potentialvektor / Gradient der Suchrichtung	f
sum	für die Substitutionen genutzte Summe	f

E. Manual zu *IP3DInv_{DC}*

Der Algorithmus *IP3DInv_{DC}* invertiert für eine beliebige Elektrodenverteilung an der Oberfläche oberhalb eines polarisibaren oder unpolarisierbaren dreidimensionalen Untergrundes IP Transienten im Zeitbereich. Das Flussdiagramm zum Aufbau des Programms in Abbildung E.1 beinhaltet die verwendeten **Routinen**, *Ein-* und *Ausgabedateien*.

E.1. Kompilieren und Ausführen

Der folgende Befehl wird zum Kompilieren des Programms *IP3DInv_{DC}* verwendet:

```
gfortran -fopenmp -mmodel=large -O3 -g -o IP3DInv_DC IP3DInv_DC.f95
spline.f95 ab.f95 splint.f95 reawri.f95 dirichlet.f95 sym.f95
cgpc.f95 skal.f95 eqsolv.f95 dreid.f95 readin.f95 wrtdat.f95 wrtrms.f95
choldc.f95 cholsl.f95 wrtmod.f95 wrtcover.f95
```

Der folgende Befehl wird zum Ausführen des Programms *IP3DInv_{DC}* verwendet:

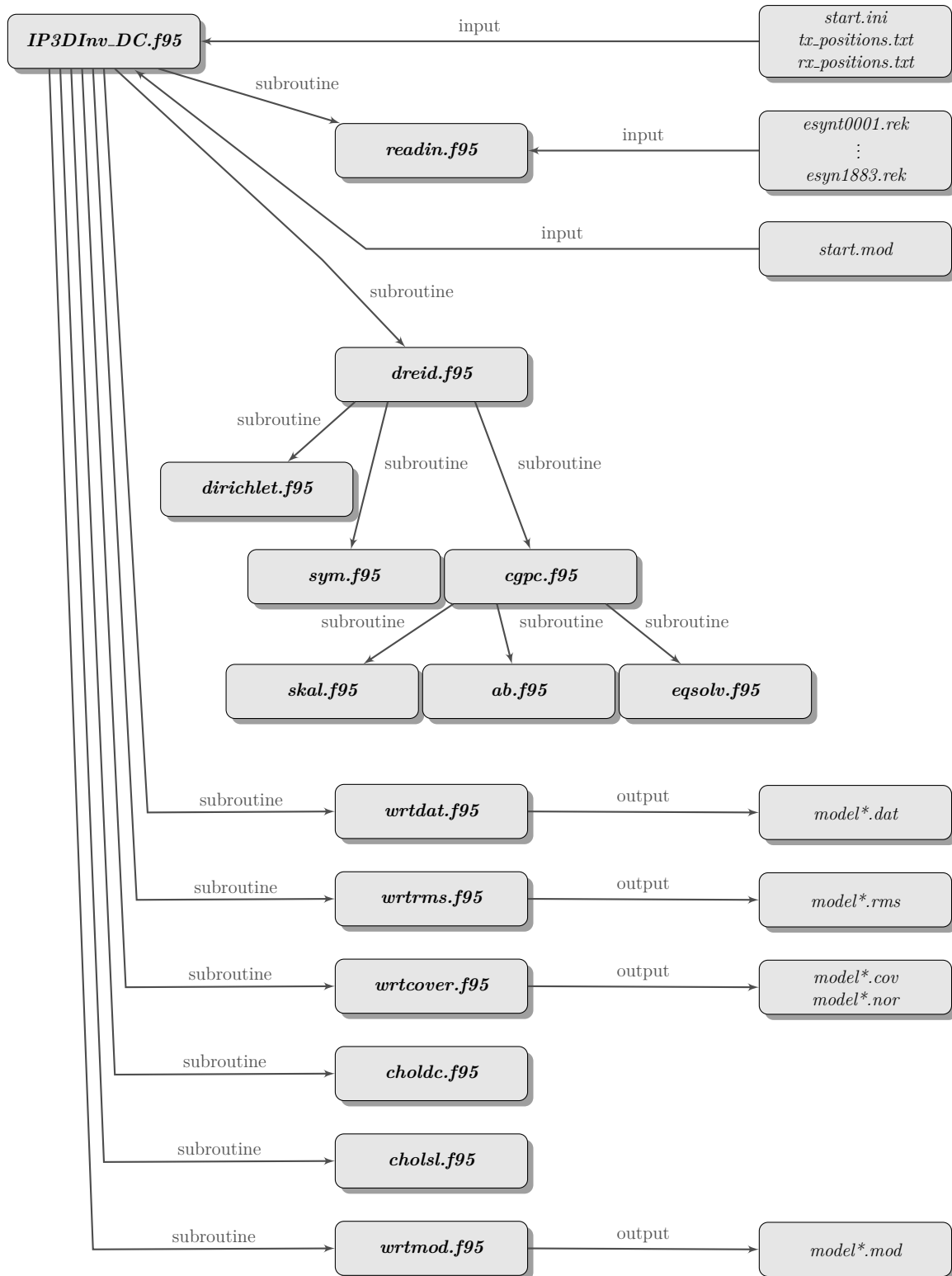
```
./IP3DInv_DC
```

Schnell-Anleitung

Die wählbaren Variablen sind in den Zeilen 34 und 63-96 von *IP3DInv_DC.f95* zu finden.

- Anzahl der gefixten Zellen in x-, y- und z-Richtung (ishift, jshift, kshift):
Es sollten in x- und y-Richtung mindestens 2 Zellen vor bzw. nach der ersten und der letzten Elektrodenposition verwendet werden. In z-Richtung sollten mindestens zwei Zellen unterhalb der abgeschätzten Eindringtiefe flexibel sein.
- Maximale Anzahl der Iterationen festlegen (itnmax):
Für die Inversion des letzten Zeitpunkts sind meist 30 Iterationen ausreichend. Für die Inversion aller Zeitpunkte reichen meist schon 3-5 Iterationen aus, vorallem bei einer Überschreibung des Startmodells.

- Startwerte der Regularisierungsparameter β und τ festlegen (taustart, betastart):
Die Startwerte sollten nach dem L-Curve-Verfahren gewählt werden. Für einen ersten Überblick ist meist die Wahl von ähnlichen Werten zwischen 1-10 hilfreich. Je größer β gewählt wird, desto stärker werden Ähnlichkeiten zum Startmodell belohnt. Ein großes τ führt zu stark geglätteten Modellen.
- Verkleinerungs-Faktor jeder Iteration für β und τ festlegen (betafactor, taufactor):
Die Werte sollten zwischen 1-2 gewählt werden. Ein Wert von 1,35 hat sich in der Praxis als gut erwiesen.
- Art der Regularisierung und γ , falls msg-Regularisierung gewählt, festlegen (regutype, msgbeta):
Bei einer startstrukturierten Struktur ist die msg-Regularisierung hilfreich. Je kleiner γ desto weniger aber beliebig starke Kontraste im Modell werden forciert.
- Glättungsfaktoren in x-,y- und z-Richtung festlegen (wx, wy, wz):
Die Wahl einer großen Glättung in x- und y-Richtung bei kleiner Glättung in z-Richtung führt zu geschichteten Untergrundmodellen.
- Prozentuales Fehlerlevel festlegen (errlev):
Entsprechend synthetischer Studien kann ein prozentuales Fehlerlevel auf alle Messdaten aufaddiert werden (z.B. 5%).
- Ersten und letzten zu nutzenden Zeitpunkt festlegen (ft, lt):
Für die Inversion des letzten Zeitpunktes werden z.B. ft=lt=47 gewählt (bei 47 Zeitpunkten). Für die Inversion des 8. bis zum 47. Zeitpunkt werden ft=8 und lt=47 gewählt.
- Wählen ob der durchschnittliche scheinbare Widerstand als homogenes Startmodell genutzt werden soll (ifaver):
1: aus allen gemessenen Potentialdifferenzen wird ein durchschnittlicher scheinbarer Widerstand berechnet und als Startmodell ein homogener Halbraum mit diesem Wert verwendet. 0: das Startmodell aus *start.mod* wird verwendet.
- Wählen ob *start.mod* nach jeder Iteration durch das neue Modell ersetzt werden soll (ifstart):
1: *start.mod* wird nach jeder Iteration mit dem neuen Modell überschrieben (für die Inversion aller Zeitpunkte sinnvoll). 0: Es wird immer das Startmodell aus *start.mod* verwendet.

Abbildung E.1.: Aufbau des Programms *IP3DInv_{DC}*

E.2. Aufbau des Programms *IP3DInv_DC.f95*

Im Folgenden wird der Aufbau des Programms *IP3DInv_{DC}* beschrieben, welches das in 4.2 beschriebene Vorgehen umsetzt.

E.2.1. define parameter, read fielddata and startmodell

define regularisation parameter Die Art der lokalen Regularisierung und die Startwerte der Regularisierungsparameter werden festgesetzt. Ein gleichmäßiges, prozentualles Fehlerlevel kann festgelegt werden. Der erste und der letzte zu berechnende Zeitpunkt wird festgelegt.

set regularisation switch Der Merker für die erste Iteration des ersten Zeitpunkts wird als wahr gesetzt.

read start.ini-file Die Anzahl der Transienten, Sender und Empfänger je Sender wird aus der Datei *start.ini* eingelesen. Die Namen der Dateien der Transienten der einzelnen Sender-Empfänger-Kombinationen werden eingelesen.

electrode positions and geometry factor Die Sender- und Empfängerpositionen werden aus *tx-positions.txt* eingelesen und der k-Faktor jeder Auslage entsprechend (3.38) berechnet.

begin loop over timepoints

read fielddata Beginn der Schleife über alle Zeitpunkte vom letzten zum ersten zu berechnenden Zeitpunkt. Die Subroutine *readin.f95* wird aufgerufen und die Transienten aller Sender-Empfänger-Kombinationen eingelesen. Ein gleichmäßiges prozentualles Fehlerlevel wird auf die prozentualen Messfehler aufaddiert.

calculate error covariance matrix rddinv = diag(1/dev(i)^2) Die Fehler-Kovarianz-Matrix wird aus den relativen Standardabweichungen berechnet.

set flags for unique calculations Die Merker für die erste Iteration jedes Zeitpunkts, für die erste Sender-Empfänger-Kombination der ersten Iteration jedes Zeitpunkts, für die erste Sender-Empfänger-Kombination jeder Iteration jedes Zeitpunkts und für jede Iteration jedes Zeitpunkts werden als „wahr“ gesetzt.

set up regularization parameter for the first iteration Die Regularisierungsparameter werden für jeden Zeitpunkt auf den Startwert gesetzt.

set up rmsold for first iteration Für jeden Zeitpunkt wird für die erste Iteration der RMS und χ^2 auf einen Startwert gesetzt.

read header, coordinates of electrodes and grid nodes, resistivity codes and resistivities of horizontal layers from start.mod-file Das Startmodell wird aus *start.mod* eingelesen. Die Anzahl der Gitterzellen in x-, y-, z-Richtung, die Koordinaten der Gitterpunkte und die Widerstände bzw. Leitfähigkeiten der Zellen werden gespeichert.

store resistivity Die Anzahl der Gitterpunkte, der Gitterzellen, der freien Gitterzellen und der Sender-Empfänger-Kombinationen wird berechnet. Für die erste Iteration werden die Widerstände der Gitterzellen als Vektoren gespeichert.

begin loop over iterations

Die Leitfähigkeiten des Modells der aktuellen Iteration werden als Matrix gespeichert.

only for m = 1: store reduced vectors (istore=.true.) Für die erste Sender-Empfänger-Kombination der ersten Iteration werden die Leitfähigkeiten aller freien Zellen des Startmodells in komprimierter Form abgespeichert. Für die erste Sender-Empfänger-Kombination jeder Iteration werden die Leitfähigkeiten aller freien Zellen des aktuellen Modells in komprimierter Form abgespeichert. Der Merker für die erste Sender-Empfänger-Kombination jeder Iteration jedes Zeitpunkts und der für die erste Sender-Empfänger-Kombination der ersten Iteration jedes Zeitpunkts wird als „falsch“ gesetzt.

E.2.2. calculation of the synthetic data-set

Die aktuellen Senderpositionen werden festgelegt, dabei werden alle Sender- und Empfängerpositionen durchlaufen. Für jede Senderposition wird *dreid.f95* aufgerufen und die durch Stromeinspeisung an diesen Positionen erzeugten Potentiale aller Zellen berechnet.

store surface values (k=1) Die Oberflächenpotentiale werden gespeichert.

calculate potential gradients in x,y and z direction Der Gradient des Potentials aller Zellen in x-, y- und z-Richtung wird für jede Sender-Empfänger-Kombination berechnet. Der Merker für die erste Sender-Empfänger-Kombination der nächsten Iteration wird „wahr“ gesetzt.

calculation of the synthetic data-set Die Empfängerpositionen werden aus *rx_positions.txt* eingelesen. Die Potentialdifferenz jeder Sender-Empfänger-Kombination wird entsprechend (3.37) aus den berechneten Potentialen des aktuellen Modells berechnet.

E.2.3. calculate the error vector

Der logarithmische RMS und χ^2 der aktuellen Iteration werden berechnet.

write out data (synthetic and field data) for each iteration Die Subroutine *wrt-dat.f95* wird aufgerufen und die berechneten Potentialdifferenzen des Modells der aktuellen Iteration werden mit den Messdaten und der linearen Differenz zwischen gemessenen und berechneten Daten in *model*.dat* geschrieben.

write out the rms error for the former iteration Die Subroutine *wrtrms.f95* wird aufgerufen und die berechneten Fehler *RMS* und χ^2 werden in *model*.rms* geschrieben.

control if rms gets smaller with this iteration and apply smaller model update if rms > rmsold (decrease model change by factor = 0.5) Es wird kontrolliert, ob der Fehler des aktuellen Modells kleiner ist als der des vorherigen. Hat sich die Anpassung verschlechtert, wird das Modell in entgegengesetzte Richtung mit der halben Schrittweite korrigiert. Die Iteration wird mit dem neuen Modell erneut durchgeführt. Ist χ^2 jedoch unter 1,0 gefallen wird die Inversion beendet, da die Daten innerhalb der Fehler angepasst wurden.

E.2.4. calculation of the (log) sensitivity matrix $df_i/dm_{j \cdot m_j/f_i}$

Die Sensitivitätsmatrix wird für jede Sender-Empfänger-Kombination für alle Zellen berechnet

$$a_{i,j,k,p} = v_{i,j,k} \cdot ((\nu_{x,i,j,k,ps} \cdot \nu_{x,i,j,k,pe}) + (\nu_{y,i,j,k,ps} \cdot \nu_{y,i,j,k,pe}) + (\nu_{z,i,j,k,ps} \cdot \nu_{z,i,j,k,pe})) \cdot \frac{\sigma_{i,j,k}}{esynt_p} \quad (E.1)$$

Durch Aufaddieren der Sensitivitäten der einzelnen Sender-Empfänger-Kombinationen wird die Coverage-Matrix und die auf Zellgröße und Maximalwert nor-

mierte Coverage-Matrix berechnet

$$cover_{i,j,k} = \sum_{p=1}^{nd} \frac{a_{i,j,k,p}}{vol_{i,j,k} \cdot a_{max}}. \quad (E.2)$$

Die Subroutine **wrtcover.f95** wird aufgerufen und die Coverage-Matrizen werden in *model*cov* und *model*nor* ausgegeben.

set up beta and tau for each iteration Die Regularisierungsparameter der lokalen und globalen Regularisierung werden für die folgende Iteration verringert.

calculate weighted a_transpose * a Das Produkt der mit den Standardabweichungen gewichteten Sensitivitätsmatrix mit der transponierten Sensitivitätsmatrix wird berechnet

$$\mathbf{a}_p^T \cdot \mathbf{rddinv}^T \mathbf{rddinv} \cdot \mathbf{a} \quad (E.3)$$

E.2.5. stabilize inversion with smoothness constraint

calculate regularization matrix only at the first iteration Für die erste Iteration wird die lokale Regularisierungsmatrix berechnet.

calculate dx Die Glättungsmatrix in x-Richtung wird berechnet. Nur die Hauptdiagonale und die erste obere Nebendiagonale enthalten dabei von null verschiedene Werte und unterscheiden sich nur durch das Vorzeichen.

calculate dy Die Glättungsmatrix in y-Richtung wird berechnet. Nur die Hauptdiagonale und die (im*km)-te obere Nebendiagonale enthalten dabei von null verschiedene Werte und unterscheiden sich nur durch das Vorzeichen.

calculate dz Die Glättungsmatrix in z-Richtung wird berechnet. Nur die Hauptdiagonale und die im-te obere Nebendiagonale enthalten mit ± 1 von null verschiedene Werte und unterscheiden sich nur durch das Vorzeichen.

calculate dxt * dx + dzt * dz Die Glättungsmatrizen in x-, y- und z-Richtung werden zu einer gemeinsamen Glättungsmatrix zusammengefasst

$$\mathbf{reg} = wx \cdot \mathbf{dx}^T \mathbf{dx} + wy \cdot \mathbf{dy}^T \mathbf{dy} + wz \cdot \mathbf{dz}^T \mathbf{dz} \quad (E.4)$$

stabilize: (hessian + beta*I) Das Produkt der mit den Standardabweichungen gewichteten Sensitivitätsmatrix mit der transponierten Sensitivitätsmatrix wird mit den Regularisierungen stabilisiert:

$$\mathbf{a}_p^T \cdot \mathbf{rddinv}^T \mathbf{rddinv} \cdot \mathbf{a} + \tau \cdot \mathbf{reg} + \beta \cdot \mathbf{I} \quad (\text{E.5})$$

E.2.6. calculate gradient weighted

calculate deltaw = rddinv * delta Die Abweichung der berechneten und der gemessenen Potentialdifferenz wird mit der Fehler-Kovarianz-Matrix gewichtet.

$$\mathbf{deltaw} = \mathbf{rddinv} \cdot \mathbf{delta2} \quad (\text{E.6})$$

calculate at * deltaw + tau * ltl * (mj - m0) Das Modellupdate wird berechnet. Dabei kann zwischen der L1-, L2- oder msg-Norm gewählt werden. Zuerst wird der Beitrag jeder Sender-Empfänger-Kombination berechnet

$$\mathbf{grad} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{deltaw} \cdot \frac{kfac}{|kfac|} \quad (\text{E.7})$$

Die Multiplikation mit dem Betrag des Geometriefaktors ermöglicht eine gemeinsame Verarbeitung von Dipol- und Gradientenauslagen. Da für eine Dipolauslage ein negativer Gradientenbeitrag und für alle anderen Auslagen ein positiver Gradientenbeitrag benötigt wird.

$$\mathbf{dm} = \mathbf{grad} + \tau \cdot \mathbf{reg} \cdot (\ln(\mathbf{sigitr}) - \ln(\mathbf{sigi0r})) \quad \text{L1-Norm} \quad (\text{E.8})$$

$$\mathbf{dm} = \mathbf{grad} + \tau \cdot \mathbf{reg} \cdot (\ln(\mathbf{sigitr}) - \ln(\mathbf{sigi0r}))^2 \quad \text{L2-Norm} \quad (\text{E.9})$$

$$\mathbf{dm} = \mathbf{grad} + \tau \cdot \mathbf{reg} \cdot \frac{(\ln(\mathbf{sigitr}) - \ln(\mathbf{sigi0r}))^2}{(\ln(\mathbf{sigitr}) - \ln(\mathbf{sigi0r}))^2 + msgbeta} \quad \text{msg-Norm} \quad (\text{E.10})$$

Das Modell-Update wird über die Beiträge der einzelnen Sender-Empfänger-Kombinationen und die regularisierte Differenz des aktuellen Modells und des Startmodells jeder Zelle berechnet.

solution of (hessian + beta * I) * dm = -grad Die Subroutine *choldc.f95* wird aufgerufen und die positiv definierte, symmetrische Matrix **ata** wird mittels der Cholesky-Zerlegung in eine untere und eine obere Dreiecksmatrix zerlegt. Die untere Dreiecksmatrix wird in den Nebendiagonalen von **ata** und einem zusätzlichen Vektor **p** abgespeichert, welcher die Hauptdiagonalelemente der unteren Dreiecksmatrix enthält.

Die Subroutine ***cholsl.f95*** wird aufgerufen und das Lineare Gleichungssystem wird durch Rücksubstitution gelöst.

model update includes a limitation of the model update to one decade Das Modell-Update wird durchgeführt. Die Widerstände jeder Zelle des Modells werden für die nächste Iteration entsprechend des berechneten Modell-Updates erhöht oder reduziert. Die maximale Änderung ist dabei auf eine Dekade beschränkt, so dass zu große Modell-Sprünge vermieden werden.

$$\text{rhoit} = \frac{1}{\text{sigitr} \cdot \text{dm}} \quad (\text{E.11})$$

write out the model for next iteration Die Subroutine ***wrtmod.f95*** wird aufgerufen und das Modell der nächsten Iteration wird rausgeschrieben.

prepare for next iteration Der Merker für jede Iteration jedes Zeitpunkts wird als "wahr" gesetzt und der für die 1. Sender-Empfänger-Kombination der 1. Iteration jedes Zeitpunkts als "falsch".

end loop over iterations

end loop over timepoints

E.3. Aufbau der einzelnen Subroutinen

Im Folgenden wird die genaue Umsetzung des in 4.2 erläuterten Vorgehens innerhalb der verwendeten Subroutinen beschrieben.

E.3.1. Subroutine ***readin.f95***

Input / Output

Input Dateiname des *.rek-Files der aktuellen Sender-Empfänger-Kombination

Output die Potentialdifferenz und der jeweilige Fehler des aktuellen Zeitpunkts der aktuellen Sender-Empfänger-Kombination

Aufbau

read line 1 of .rek file header Die erste Zeile des Headers wird eingelesen (Informationen werden nicht verwendet)

⋮

read line 11 - 15 of .rek file header Die 11. bis 15. Zeile des Headers wird eingelesen (Informationen werden nicht verwendet)

read line 16 of .rek file header Die Anzahl der Zeitpunkte wird eingelesen.

read line 17-19 of .rek file header Die 17. bis 19. Zeile des Headers wird eingelesen (Informationen werden nicht verwendet)

read data (line 20-end) Die Zeitpunkte in [ms] und [s], die Potentialdifferenz und der Fehler jedes Zeitpunkts werden eingelesen.

output storage Der entsprechende Zeitpunkt, die dazugehörige Potentialdifferenz und der jeweilige Fehler werden abgespeichert.

E.3.2. Subroutine *dreid.f95*

siehe D.3.2

E.3.3. Subroutine *dirichlet.f95*

siehe D.3.3

E.3.4. Subroutine *sym.f95*

siehe D.3.4

E.3.5. Subroutine *cgpc.f95*

siehe D.3.5

E.3.6. Subroutine *skal.f95*

siehe D.3.6

E.3.7. Subroutine *ab.f95*

siehe D.3.7

E.3.8. Subroutine *eqsolv.f95*

siehe D.3.8

E.3.9. Subroutine *wrt-dat.f95*

Input / Output

Input die Nummer der vorherigen Iteration, aktueller Zeitpunkt, berechneten Potentialdifferenzen des Modells der aktuellen Iteration, die Messdaten und die lineare Differenz zwischen gemessenen und berechneten Daten

Output -

Aufbau

Die Nummer der Sender-Empfänger-Kombination, die berechneten Potentialdifferenzen des Modells der aktuellen Iteration, die Messdaten und die lineare Differenz zwischen gemessenen und berechneten Daten werden für alle Sender-Empfänger-Kombinationen in *model*.dat* rausgeschrieben.

E.3.10. Subroutine *wrt-rms.f95*

Input / Output

Input berechneter *RMS* und χ^2 des Modells der aktuellen Iteration, die Nummer der vorherigen Iteration und des aktuellen Zeitpunkts

Output -

Aufbau

Die berechneten Fehler *RMS* und χ^2 des Modells der aktuellen Iteration werden rausgeschrieben.

E.3.11. Subroutine *wrt-cover.f95*

Input / Output

Input Die Gitterzellengrößen in x-, y- und z-Richtung, die Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung, die Coverage-Matrix, die vorherige Iterationsnummer, der aktuelle Zeitpunkt

Output -**Aufbau**

Die Gitterzellengrößen in x-, y- und z-Richtung, die Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung und die Coverage-Matrix werden in *model*.cov* rausgeschrieben. Die auf die Zellgröße und den Maximalwert normierte Coverage-Matrix wird in *model*.nor* rausgeschrieben.

E.3.12. Subroutine *choldc.f95***Input / Output**

Input Das Produkt der Transponierten der gewichteten mit der Sensitivitätsmatrix, die Anzahl der Gitterpunkte und die Anzahl der freien Gitterzellen

Output Die untere Dreiecksmatrix und die Hauptdiagonale der Unteren Dreiecksmatrix nach Cholesky-Zerlegung

Aufbau

Die Matrix **A** wird in eine untere **L** und in eine obere Dreiecksmatrix **L^T** zerlegt [Press et al. (1992)] . Aufgrund der positiv definierten, symmetrischen Form von **A** kann die Transponierte der unteren Dreiecksmatrix als obere Dreiecksmatrix definiert werden.

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{L}^T = \mathbf{A} \quad (\text{E.12})$$

Teilweise wird diese Art der Zerlegung auch als "ziehen der Quadratwurzel aus der Matrix **A**" bezeichnet. Die Cholesky-Zerlegung ist um einen Faktor zwei schneller als alternative Methoden. Für die Hauptdiagonalelemente gilt

$$L_{ii} = \left(A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}^2 \right)^{1/2} \quad (\text{E.13})$$

und für die Elemente der Nebendiagonalen

$$L_{ji} = \frac{1}{L_{ii}} \left(A_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik} L_{jk} \right) \quad j = i + 1, i + 2, \dots, N. \quad (\text{E.14})$$

Die Einträge der unteren Dreiecksmatrix werden in den unteren Nebendiagonalen der Matrix **A** abgespeichert und zum Berechnen nur die Elemente der oberen Nebendiagonalen und der Hauptdiagonalen von **A** verwendet. Es muss somit nur ein

zusätzlicher Vektor mit den Hauptdiagonalelementen der unteren Dreiecksmatrix abgespeichert werden, was neben der geringeren Laufzeit ein weiterer Vorteil ist.

E.3.13. Subroutine *cholsl.f95*

Input / Output

Input Das Produkt der Transponierten der gewichteten mit der Sensitivitätsmatrix, die untere Dreiecksmatrix der Cholesky-Zerlegung, die Anzahl der Gitterpunkte, die Anzahl der freien Gitterzellen, die Hauptdiagonale der Unteren Dreiecksmatrix nach Cholesky-Zerlegung und das Modell-Update jeder Zelle

Output Das Modell-Update jeder Zelle

Aufbau

Das Gleichungssystem $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ mit der in E.3.12 zerlegten Matrix \mathbf{A} wird durch Rücksubstitution gelöst [Press et al. (1992)].

Für die Elemente von \mathbf{x} werden über

$$x_i = \frac{1}{p_i} \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} x_k \right). \quad (\text{E.15})$$

und

$$x_i = \frac{1}{p_i} \left(x_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{ki} x_k \right) \quad (\text{E.16})$$

berechnet. Hierbei wird nur der Vektor \mathbf{x} neu belegt, so dass für alle weiteren Iterationen \mathbf{A} auch für andere \mathbf{b} nicht erneut berechnet werden muss.

E.3.14. Subroutine *wrtmod.f95*

Input / Output

Input Die Gitterzellengrößen in x-, y- und z-Richtung, die Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung, das Widerstandsmodell, die aktuelle Iterationsnummer, der aktuelle Zeitpunkt

Output -

Aufbau

Die Gitterzellengrößen in x-, y- und z-Richtung, die Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung und die Widerstände der Zellen werden in *model*.mod* rausgeschrieben.

E.4. Input- und Output-Dateien

Der Aufbau und der Inhalt der verwendeten und erzeugten Dateien werden im Folgenden grundsätzlich und an einem Beispiel erläutert.

E.4.1. *start.ini* Dateinamen der Transienten-Files

Enthält

- Anzahl der Sender-Empfänger-Kombinationen, Anzahl der Sender, Anzahl der Empfänger je Sender
- Name der *.rek-Files jeder einzelnen Sender-Empfänger-Kombination

Beispiel mit 269 Sendern und je 7 Empfängern:

start.ini

```
1883 269 7 (Anzahl der *.rek-Files, der Sender und der Empfänger je Sender)
esyn0001.rek (Name des *.rek-Files der ersten Sender-Empfänger-Kombination )
esyn0002.rek
esyn0003.rek
:
:
esyn1881.rek
esyn1882.rek
esyn1883.rek (Name des *.rek-Files der letzten Sender-Empfänger-Kombination )
```

E.4.2. *tx_positions.txt* Sender- und Empfängerpositionen

Enthält

- Elektrodenpositionen aller verwendeten Sender und Empfänger

Beispiel mit 269 Sendern und je 7 Empfängern:

tx_positions.txt

```
9 9 1 43 9 1 (Elektrodenposition des 1. Senders)
12 9 1 16 9 1 (Elektrodenposition des 1. Empfängers des 1. Senders)
20 9 1 24 9 1 (Elektrodenposition des 2. Empfängers des 1. Senders)
28 9 1 32 9 1
36 9 1 40 9 1
16 9 1 20 9 1
24 9 1 28 9 1
32 9 1 36 9 1 (Elektrodenposition des 7. Empfängers des 1. Senders)
5 9 1 29 9 1 (Elektrodenposition des 2. Senders)
10 9 1 12 9 1 (Elektrodenposition des 1. Empfängers des 2. Senders)
:
:
27 19 1 28 19 1 (Elektrodenposition des 7. Empfängers des 268. Senders)
```


E.4.5. *rx_positions.txt* Empfängerpositionen

Enthält

- Elektrodenpositionen aller verwendeten Empfänger

Beispiel mit 269 Sendern und je 7 Empfängern:

rx_positions.txt

```

12  9  1 16  9  1 (Elektrodenposition des 1. Empfängers des 1. Senders)
20  9  1 24  9  1 (Elektrodenposition des 2. Empfängers des 1. Senders)
28  9  1 32  9  1
36  9  1 40  9  1
16  9  1 20  9  1
24  9  1 28  9  1
32  9  1 36  9  1 (Elektrodenposition des 7. Empfängers des 1. Senders)
10  9  1 12  9  1 (Elektrodenposition des 1. Empfängers des 2. Senders)
:
27 19  1 28 19  1 (Elektrodenposition des 7. Empfängers des 268. Senders)
32 19  1 33 19  1 (Elektrodenposition des 1. Empfängers des 269. Senders)
33 19  1 34 19  1
34 19  1 35 19  1
35 19  1 36 19  1
38 19  1 39 19  1
37 19  1 38 19  1
36 19  1 37 19  1 (Elektrodenposition des 7. Empfängers des 269. Senders)

```

E.4.6. *model*.dat* berechnete Potentialdifferenzen

Enthält

- Nummern der Sender-Empfänger-Kombinationen, die berechneten Potentialdifferenzen des Modells der aktuellen Iteration, die Messdaten und die lineare Differenz zwischen gemessenen und berechneten Daten

Beispiel mit 269 Sendern und je 7 Empfängern:

model.dat*

```

(Nummer der Sender-Empfänger-Kombination , Differenz von berechneten und gemessenen
Potentialdifferenz, berechnete Potentialdifferenz, gemessene Potentialdifferenz,
Fehler der Potentialdifferenz)
1 -0.004051  0.007989  0.012040  0.020000 -0.000482 (des 1. Empfängers des 1. Senders)
2 -0.000435  0.001256  0.001691  0.020000 -0.000068 (des 2. Empfängers des 1. Senders)
:
7 -0.000860  0.002257  0.003117  0.020000 -0.000125 (des 7. Empfängers des 1. Senders)
8 -0.000962  0.002375  0.003337  0.020000 -0.000133 (des 1. Empfängers des 2. Senders)
:
1883 -0.002360  0.004785  0.007145  0.020000 -0.000286 (des 7. Empfängers des 269. Senders)

```


E.4.9. *model*.nor*

Enthält

- Anzahl der Zellen in x-, y-, z-Richtung
- Koordinaten der Eckpunkte der Gitterzellen
- auf Zellgröße und Maximalwert normierte Coverage jeder Zelle

Beispiel mit einem homogenen Halbraum: Siehe E.4.8

E.4.10. *model*.mod*

Enthält

- Anzahl der Zellen in x-, y-, z-Richtung
- Koordinaten der Eckpunkte der Gitterzellen
- Widerstand jeder Zelle

Beispiel mit einem homogenen Halbraum:***model*.mod***

```

0  50 25 20 start modell (Anzahl der Zellen in x-, y-, z-Richtung )
0  0  0  0  0  0 ✓(x-Gitterkoordinaten)
-200.00 -103.00 -70.00 -58.00 -51.25 -48.75 -46.25 -43.75 -41.25 -38.75
-36.25 -33.75 -31.25 -28.75 -26.25 -23.75 -21.25 -18.75 -16.25 -13.75
-11.25 -8.75 -6.25 -3.75 -1.25 1.25 3.75 6.25 8.75 11.25
13.75 16.25 18.75 21.25 23.75 26.25 28.75 31.25 33.75 36.25
38.75 41.25 43.75 46.25 48.75 51.25 58.00 70.00 103.00 200.00
-100.00 -43.00 -32.00 -27.00 -20.00 -17.50 -15.00 -12.50 -10.00 -7.50
-5.00 -2.50 0.00 2.50 5.00 7.50 10.00 12.50 15.00 17.50
20.00 27.00 32.00 43.00 100.00 (y-Gitterkoordinaten)
0.00 1.25 2.50 4.00 5.50 7.14 8.79 10.60 12.40 14.38
16.35 18.52 20.69 22.86 25.43 30.64 36.34 50.00 150.00 200.00
0.277934 0.350344 ... insgesamt 94 (x-1) mal ... 0.393606
0.536239 0.544945 ... insgesamt 94 (x-1) mal ... 0.586908
      :
      :
      : insgesamt 23 (z-1) mal
      :
      :
0.000000 0.000000 ... insgesamt 94 (x-1) mal ... 0.000000
0.000000 0.000000 ... insgesamt 94 (x-1) mal ... 0.000000

```

↖ (z-Gitterkoordinaten)
 :
 :
 } Insgesamt 26 (y-1) mal
 :
 :

E.5. Variablen

Die verwendeten Variablen der einzelnen Routinen, ihre Bedeutung und das verwendete Format werden in diesem Abschnitt aufgelistet.

E.5.1. *IP3DInv_{DC}.f95*Tabelle E.1.: Variablen der Routine *IP3DInv_{DC}.f95*

Name	Bedeutung	Format
a	Sensitivitätsmatrix	f
aw	mit den Standardabweichungen gewichtete Sensitivitätsmatrix	f
ata	Produkt der Transponierten der gewichteten mit der Sensitivitätsmatrix	f
betastart	Startwert des globalen Regularisierungsparameters	f
beta	globaler Glättungsparameter	f
chi	Quadratischer Fehler der Inversion gewichtet mit dem Messfehler	f
chiold	Startwert des χ^2 für jeden Zeitpunkt	f
cover	Coverage-Matrix	f
dat	Potentialdifferenz des aktuellen Zeitpunkts [V]	f
delta	Differenz zwischen gemessenen und berechneten Potentialdifferenzen	f
delta2	Differenz logarithmierter gemessener und berechneter Potentialdifferenzen	f
delta2	gewichtete Differenz logarithmierter gemessener und berechneter Potentialdifferenzen	f
dev	relative Standardabweichung der Potentialdifferenz des aktuellen Zeitpunkts [V]	f

dm	Modell-Update jeder Zelle	f
dx	Glättungsmatrix in x-Richtung	f
dy	Glättungsmatrix in y-Richtung	f
dz	Glättungsmatrix in z-Richtung	f
epx	Gradient des Potentials in x-Richtung	f
epy	Gradient des Potentials in y-Richtung	f
epz	Gradient des Potentials in z-Richtung	f
errlev	gleichmäßiges, prozentualles Fehlerlevel	f
esynt	berechnete Potentialdifferenzen der Sender-Empfänger-Kombinationen des aktuellen Modells	f
ft	Nummer des erster zu berechnenden Zeitpunkts	i
grad	Beitrag jeder Sender-Empfänger-Kombination zum Modell-Update	f
icfirst	Merker für die 1. Sender-Empfänger-Kombination der 1. Iteration jedes Zeitpunkts	l
ico1, ico2	aktuelle Empfänger des aktuellen Senders	i
icontrol	Merker für jede Iteration jedes Zeitpunkts	l
im	Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung	i
iq1, iq2	Elektrodenpositionen der aktuellen Senderposition	i
ireg	Merker für die 1. Iteration des ersten Zeitpunkts	l
ishift	Anzahl der fixierten Randzellen in x-Richtung	i
istore	Merker für die 1. Sender-Empfänger-Kombination jeder Iteration jedes Zeitpunkts	l
iterate	Nummer der aktuellen Iteration	i
itfirst	Merker für 1. Iteration des jedes Zeitpunkts	l
itime	Zeitpunkt	i
jm	Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung	i
jshift	Anzahl der fixierten Randzellen in y-Richtung	i
kfac	Geometriefaktoren der verwendeten Auslagen	f
km	Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung	i
kshift	Anzahl der fixierten Randzellen in z-Richtung	i
τ	lokaler Regularisierungsparameter	f
lt	Nummer des letzten zu berechnenden Zeitpunkts	i
msgbeta	kleine, reelle Konstante des Minimum-Gradient-Support	f
nd	Anzahl der Transienten	i
npata	Anzahl der Gitterpunkte	i
npar	Anzahl der Gitterzellen	i
nparr	Anzahl der freien Gitterzellen	i
numre	Anzahl der Empfänger je Sender	i
numspr	Anzahl der Sender	i
p	Hauptdiagonalelemente der Unteren Dreiecksmatrix ata nach Cholesky-Zerlegung	f
rekfile	Namen der Dateien der einzelnen Sender-Empfänger-Kombinationen	a
reg	zusammengefasste Glättungsmatrix in alle Richtungen	f
regutype	Art der lokalen Regularisierungsparameters	f
rho	Widerstand der Zellen für die aktuelle y- und z-Koordinate	f
rho0	Widerstände des Startmodells	f
rhoit	Widerstände des Modells der aktuellen Iteration	f
rms	Fehler der Inversion gewichtet mit dem Messwert (Root Mean Square Error)	f
rmsold	Startwert des RMS für jeden Zeitpunkt	f
rxpos	alle verwendeten Empfängerpositionen	i
sigmac	Leitfähigkeiten des Modells der aktuellen Iteration	f
stime	aktueller Zeitpunkt [s]	f
taustart	Startwert des lokalen Regularisierungsparameters	f
txpos	alle verwendeten Sender- und zugehörige Empfängerpositionen	i
vol	Zellvolumen	f
wx,wy,wz	Glättungsfaktoren der lokalen Regularisierung in x-, y- und z-Richtung	f
vm	Potentiale aller Zellen der aktuellen Senderpositionen	f
vsurf	Oberflächenpotentiale der aktuellen Senderpositionen	f
x	Koordinaten der Gitterpunkte in x-Richtung	f
y	Koordinaten der Gitterpunkte in y-Richtung	f
z	Koordinaten der Gitterpunkte in z-Richtung	f

E.5.2. *readin.f95*Tabelle E.2.: Variablen der Routine *readin.f95*

Name	Bedeutung	Format
dat	Potentialdifferenz des aktuellen Zeitpunkts [V]	f
delta	Prozentualler Fehler der Potentialdifferenz [V]	f
dev	relative Standardabweichung der Potentialdifferenz des aktuellen Zeitpunkts [V]	f
idata	Zeitpunkt [ms]	f
infile	Name des *.rek-Files der aktuellen Sender-Empfänger-Kombination	a
n	Anzahl der Zeitpunkte im *.rek-File	i
pe,pl	Potentialdifferenz [V]	f
stime	aktueller Zeitpunkt [s]	f
time	Zeitpunkt [s]	f

E.5.3. *dreid.f95*

siehe D.5.3

E.5.4. *dirichlet.f95*

siehe D.5.4

E.5.5. *sym.f95*

siehe D.5.5

E.5.6. *cgpc.f95*

siehe D.5.6

E.5.7. *skal.f95*

siehe D.5.7

E.5.8. *ab.f95*

siehe D.5.8

E.5.9. *eqsolv.f95*

siehe D.5.9

E.5.10. *wrtdat.f95*

Tabelle E.3.: Variablen der Routine *wrtdat.f95*

Name	Bedeutung	Format
dat	Potentialdifferenz des aktuellen Zeitpunkts [V]	f
delta	Differenz zwischen gemessenen und berechneten Potentialdifferenzen	f
dev	relative Standardabweichung der Potentialdifferenz des aktuellen Zeitpunkts [V]	f
esynt	berechnete Potentialdifferenzen der Sender-Empfänger-Kombinationen des aktuellen Modells	f
iterate	Nummer der aktuellen Iteration	i
itime	Zeitpunkt	i
nd	Anzahl der Transisenten	i

E.5.11. *wtrrms.f95*

Tabelle E.4.: Variablen der Routine *wtrrms.f95*

Name	Bedeutung	Format
chi	Quadratischer Fehler der Inversion gewichtet mit dem Messfehler	f
iterate	Nummer der aktuellen Iteration	i
itime	Zeitpunkt	i
outfile	Name des Output-Files	a
rms	Fehler der Inversion gewichtet mit dem Messwert (Root Mean Square Error)	f

E.5.12. *wrtcover.f95*

Tabelle E.5.: Variablen der Routine *wtrrms.f95*

Name	Bedeutung	Format
cover	Coverage-Matrix	f
im	Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung	i
iterate	Nummer der aktuellen Iteration	i
itime	Zeitpunkt	i
jm	Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung	i
km	Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung	i
x	Koordinaten der Gitterpunkte in x-Richtung	f
y	Koordinaten der Gitterpunkte in y-Richtung	f
z	Koordinaten der Gitterpunkte in z-Richtung	f

E.5.13. *choldc.f95*

Tabelle E.6.: Variablen der Routine *choldc.f95*

Name	Bedeutung	Format
a	Produkt der Transponierten der gewichteten mit der Sensitivitätsmatrix	f
n	Anzahl der Gitterpunkte	i
np	Anzahl der freien Gitterzellen	i
p	Hauptdiagonalelemente der Unteren Dreiecksmatrix nach Cholesky-Zerlegung	f
sum	Summe der Nebendiagonalelemente	f

E.5.14. *cholsl.f95*Tabelle E.7.: Variablen der Routine *cholsl.f95*

Name	Bedeutung	Format
a	Haupt- und obere Nebendiagonalelemente: Produkt der Transponierten der gewichteten mit der Sensitivitätsmatrix	f
b	rechte Seite des Gleichungssystems	f
n	Anzahl der Gitterpunkte	i
np	Anzahl der freien Gitterzellen	i
p	Hauptdiagonalelemente der Unteren Dreiecksmatrix nach Cholesky-Zerlegung	f
sum	Summe der Nebendiagonalelemente	f
x	Modell-Update jeder Zelle	f

E.5.15. *wrtmod.f95*Tabelle E.8.: Variablen der Routine *wrtmod.f95*

Name	Bedeutung	Format
im	Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung	i
iterate	Nummer der aktuellen Iteration	i
itime	Zeitpunkt	i
jm	Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung	i
km	Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung	i
rho	Widerstände des Modells der aktuellen Iteration	f
x	Koordinaten der Gitterpunkte in x-Richtung	f
y	Koordinaten der Gitterpunkte in y-Richtung	f
z	Koordinaten der Gitterpunkte in z-Richtung	f

F. Manual zu *IP3DInv_{IP}*

Der Algorithmus *IP3DInv_{IP}* invertiert für eine beliebige Elektrodenverteilung an der Oberfläche oberhalb eines polarisibaren oder unpolarisierbaren dreidimensionalen Untergrundes IP Transienten im Zeitbereich. Das Flussdiagramm zum Aufbau des Programms in Abbildung F.1 beinhaltet die verwendeten *Routinen*, *Ein-* und *Ausgabedateien*.

F.1. Kompilieren und Ausführen

Der folgende Befehl wird zum Kompilieren des Programms *IP3DInv_{IP}* verwendet:

```
gfortran -o IP3DInv_IP IP3DInv_IP.f95 reaini.f95 read3d.f95 ip_inv.f95  
wrt3dmod.f95 readmo.f95 jacoby.f95 ludcmp.f95 lubksb.f95 wrtout.f95  
guppy.f95 spline.f95
```

Der folgende Befehl wird zum Ausführen des Programms *IP3DInv_{IP}* verwendet:

```
./IP3DInv_IP
```

Schnell-Anleitung

Die wählbaren Variablen sind in den Zeilen 13 und 40 von *IP3DInv_IP.f95* und in den Zeilen 31-32 in *ip_inv.f95* zu finden.

- Maximale Anzahl der Zellen in x-, y- und z-Richtung (imax,jmax,kmax)
- Maximale Anzahl der Zeitpunkte (ndmax)
- Wahl des verwendeten IP-Modells (model):
Automatische Abfrage des zu verwendenden IP-Modells über die Shell. Es kann zwischen Madden (1), Warburg (2), Debye (3), Cole (4) und Wait (5) gewählt werden.
- Die Startwerte für ρ_{dc} (modpar(1)) und die Aufladbarkeit m (modpar(2)) sind nach 4.3.2 festgelegt und können geändert werden.

loop over the model files and storage into rhotime Die Subroutine *read3d.f95* wird aufgerufen und die DC-Modelle aller Zeitpunkte werden eingelesen.

begin loop over cells

F.2.2. IP inversion of all cells

Es wird zwischen drei möglichen Formen eines Transienten unterschieden:

1. Transient ohne IP-Effekt: der zeitabhängige Widerstand des letzten Zeitpunkts variiert nur um 1% von dem des ersten Zeitpunkts
2. Transient mit IP-Effekt: der zeitabhängige Widerstand des letzten Zeitpunkts ist um mehr als 1% erhöht gegenüber dem des ersten Zeitpunkts
3. Transient mit untypischem Verhalten: der zeitabhängige Widerstand des letzten Zeitpunkts ist um mehr als 1% erniedrigt gegenüber dem des ersten Zeitpunkts

Für den ersten und dritten Fall werden Aufladbarkeit m , Relaxationszeit τ und der Frequenzexponent c gleich null gesetzt. Der Gleichstromwiderstand ρ_0 wird gleich dem zeitabhängigen Widerstand $\rho(t)$ des letzten Zeitpunkts gesetzt. Zur Kennzeichnung der Zellen mit Transienten der dritten Kategorie wird der entsprechende Fehler auf 1000% gesetzt.

Für Zellen der zweiten Kategorie wird die Subroutine *ip_inv.f95* aufgerufen und eine homogene Halbraum Inversion des Transienten der Zelle entsprechend des gewählten Modells durchgeführt. Ist die Aufladbarkeit des besten gefundenen Modells kleiner als 0,1 werden Relaxationszeit und Frequenzexponent für diese Zelle gleich null gesetzt, da das Auflösungsvermögen für diese Parameter nicht mehr gegeben ist.

end loop over cells

write out 3d files

Die Subroutine *wrt3dmod.f95* wird aufgerufen und die Verteilung des Gleichstromwiderstands, der Aufladbarkeit, der Relaxationszeit und des Frequenzexponenten werden ausgeschrieben.

F.3. Aufbau der einzelnen Subroutinen

Im Folgenden wird die genaue Umsetzung des in 4.3 erläuterten Vorgehens innerhalb der verwendeten Subroutinen beschrieben.

F.3.1. Subroutine *reaini.f95*

Input / Output

Input Maximale Anzahl der DC-Modelle

Output Namen der DC-Modelle der verschiedenen Zeitpunkte und Anzahl der DC-Modelle

Aufbau

Die Anzahl der DC-Modelle und die Namen der einzelnen DC-Modelle werden aus *start.ini* eingelesen

F.3.2. Subroutine *read3d.f95*

Input / Output

Input Aktuelle Senderpositionen, maximale Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung, maximale Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung, maximale Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung, Namen der DC-Modelle des aktuellen Zeitpunkts

Output Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung, Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung, Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung, Koordinaten der Gitterpunkte in x-Richtung, Koordinaten der Gitterpunkte in y-Richtung, Koordinaten der Gitterpunkte in z-Richtung, zeitabhängiger Widerstand der einzelnen Zellen des aktuellen Zeitpunkts

Aufbau

Das DC-Modell des aktuellen Zeitpunkts wird aus *model*.mod* eingelesen. Die Anzahl der Gitterzellen in x-, y-, z-Richtung, die Koordinaten der Gitterpunkte und die Widerstände bzw. Leitfähigkeiten der Zellen werden gespeichert.

F.3.3. Subroutine *ip_inv.f95*

Input / Output

Input Zeitabhängiger Widerstand aller Zeitpunkte der aktuellen Zelle, Anzahl der DC-Modelle, Nummer der aktuellen Zelle, gewähltes IP-Modell

Output Gleichstromwiderstand, Aufladbarkeit, Relaxationszeit, Frequenzexponent und Fehler der aktuellen Zelle

Aufbau

readin the start model Die Subroutine *readmo.f95* wird aufgerufen und das Startmodell eingelesen. Für den Gleichstromwiderstand ρ_{dc} wird nach (4.31) ein Startwert festgelegt. Analog geschieht dies nach (4.30) für die Aufladbarkeit m . Der Frequenzexponent c wird entsprechend des gewählten IP-Modells gesetzt und es wird der Logarithmus der Modellparameter gebildet.

inversion using the marquardt approach

Der Regularisierungsparameter β wird gesetzt.

begin outer iteration loop**begin inner iteration loop**

calculate the jacobian Die Subroutine *jacoby.f95* wird aufgerufen und die Jacobi-Matrix berechnet.

calculate the error vector (log(d)-log(f(m))) Der logarithmische Fehler wird berechnet.

calculate a_transpose * a das Produkt der Transponierten der Sensitivitätsmatrix mit dieser wird berechnet.

stabilize with the marquardt factor durch die Addition des Regularisierungsparameters β auf die Hauptdiagonale der im letzten Schritt berechneten Matrix wird die Inversion stabilisiert. Bis zum Unterschreiten eines definierten Grenzwerts wird der Regularisierungsparameter mit jeder Iteration verkleinert.

store temporary atrans * a + beta * I die Matrix des letzten Schritts wird zwischen gespeichert.

inversion of a_trans * a + beta * I Die Subroutine *ludcmp.f95* wird aufgerufen und die Matrix des letzten Schritts mittels der LU-Zerlegung in das Produkt einer unteren und oberen Dreiecksmatrix zerlegt, welche in der ursprünglichen Matrix zurückgegeben werden. Anschließend wird die Subroutine *lubksb.f95* aufgerufen und das Gleichungssystem gelöst.

calculate x=(a_t * a + beta * I)^-1 * a_t * delta

calculate matrix first Das Produkt $(\mathbf{S}_{L-1}^T \mathbf{S}_{L-1} + \beta_L \cdot \mathbf{I})^{-1} \mathbf{S}_{L-1}$ wird berechnet.

now x = matrix * delta Das Modell-Update wird nach (4.21) berechnet.

model update Die einzelnen Modell-Parameter werden entsprechend des Modell-Updates modifiziert.

limitation of parameters Der Gleichstromwiderstand wird auf den Bereich von 0.000017 ($= e^{-11}$) bis 2981 ($= e^8$) beschränkt. Die weiteren Modell-Parameter werden auf den Bereich von 0.000017 ($= e^{-11}$) bis 4,95 ($= e^{1.6}$) beschränkt.

rms calculation Der Fehler wird gemäß (4.22) berechnet.

end inner iteration loop

write out results Die Subroutine *wrtout.f95* wird aufgerufen und gemessener und berechneter Transient der einzelnen Zellen werden ausgeschrieben.

store the results Die IP-Modellparameter des besten gefunden Modells werden gespeichert.

end outer iteration loop

F.3.4. Subroutine *readmo.f95*

Input / Output

Input Anzahl der IP-Modellparameter

Output IP-Werte des Startmodells

Aufbau

Die IP-Werte des Startmodells werden aus *start.mod* eingelesen.

F.3.5. Subroutine *jacoby.f95*

Input / Output

Input logarithmische IP-Modellparameter, Anzahl der DC-Modelle, Anzahl der IP-Modellparameter, gewähltes IP-Modell, Iterationsnummer

Output Jacobi-Matrix, zeitabhängiger Widerstand der pertubierten IP-Modellparameter

Aufbau

transform parameters to linear scale Die IP-Modellparameter werden vom logarithmischen in den linearen Raum transformiert.

perturbation of the parameters Entsprechend des gewählten IP-Modells und der aktuellen Iteration werden die IP-Modellparameter variiert. Dabei wird z.B. für das Cole-Cole Modell in den ersten 1000 Iterationen nur die Relaxationszeit τ und der Frequenzexponent c um 5% variiert. Kann auf diese Weise kein Fehler unterhalb des festgelegten Grenzwertes erreicht werden, so werden ab der 21. Iteration alle vier Cole-Cole Parameter variiert.

forward calculations die Subroutine *guppy.f95* wird aufgerufen und der Transient des jeweiligen, teils pertubierten IP-Modells berechnet. Abschließend wird mittels der Perturbationsmethode nach (4.23) die Sensitivitätsmatrix berechnet.

F.3.6. Subroutine *guppy.f95*

Input / Output

Input teilweise pertubierter Gleichstromwiderstand, Aufladbarkeit, Relaxationszeit und Frequenzexponent, Anzahl der Zeitpunkte

Output zeitabhängiger Widerstand des jeweiligen, teilweise pertubierten IP-Modells

Aufbau

abscissae values Abszissenwerte werden festgelegt

filter coefficients Filterkoeffizienten werden festgelegt

loop of times Beginn der Schleife über alle Zeitpunkte [ms]

loop of frequencies Kreisfrequenzen werden berechnet nach 3.3

kernel function Berechnung des frequenzabhängigen Widerstands der jeweiligen Frequenz nach 3.1

output voltage Berechnung des zeitabhängigen Widerstandes des jeweiligen Zeitpunkts nach 3.2

F.3.7. Subroutine *ludcmp.f95***Input / Output**

Input Produkt der Transponierten und der Sensitivitätsmatrix addiert mit β , Anzahl der IP-Modellparameter

Output Vektor der Zeilen-Perturbationen beeinflusst von der Pivotisierung, Vektor mit ± 1 entsprechend der graden oder ungraden Anzahl der Zeilen-Permutationen

Aufbau

Die Matrix **A** der Dimension $N \times N$ wird mittels der LU-Zerlegung durch eine zeilenweise durchgeführte Permutation ihrer selbst ersetzt [Press et al. (1992)]

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}}_L \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} \\ 0 & \beta_{22} & \beta_{23} \\ 0 & 0 & \beta_{33} \end{pmatrix}}_U = \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}}_A \quad (\text{F.1})$$

Die Elemente der Dreiecksmatrizen können durch folgendes Schema berechnet werden:

1. $\alpha_{ii} = 1$ für $i = 1, \dots, N$
2. Für $j = 1, \dots, N$ werden zwei Schritte durchgeführt:
 - a) Für $i = 1, \dots, j$:

$$\beta_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_{ik} \beta_{kj} \quad (\text{F.2})$$

- b) Für $i = j + 1, \dots, N$:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{\beta_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{ik} \beta_{kj} \right) \quad (\text{F.3})$$

Die Elemente a_{ij} werden nur einmalig verwendet, so dass die berechneten Elemente α_{ij} und β_{ij} an ihrer Stelle gespeichert werden können. Die Elemente α_{ii} müssen nicht gespeichert werden, da diese stets 1 betragen.

F.3.8. Subroutine *lubksb.f95*

Input / Output

Input LU-Zerlegung des Produkts der Transponierten und der Sensitivitätsmatrix addiert mit β , Anzahl der IP-Modellparameter, Vektor der Zeilen-Perturbationen beeinflusst von der Pivotisierung aus *ludcmp.f95*, rechtsseitiger Vektor

Output Lösungsvektor

Aufbau

Das Gleichungssystem $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ wird nach Press et al. (1992) gelöst. Die Matrix \mathbf{A} der Dimension $N \times N$ beinhaltet die LU-Zerlegung aus *ludcmp.f95*. Dabei wird die LU-Zerlegung der Matrix \mathbf{A} genutzt und das Problem in ein zwei-stufiges Problem umgeformt

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = (\mathbf{L} \cdot \mathbf{U}) \cdot \mathbf{x} = \mathbf{L} \cdot (\mathbf{U} \cdot \mathbf{x}) = \mathbf{b}. \quad (\text{F.4})$$

Im ersten Schritt wird $\mathbf{L} \cdot \mathbf{y} = \mathbf{b}$ durch Vorwärtssubstitution mit

$$y_1 = \frac{b_1}{\alpha_{11}} \quad (\text{F.5})$$

$$y_i = \frac{1}{\alpha_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} y_j \right] \quad \text{mit } i = 2, 3, \dots, N \quad (\text{F.6})$$

gelöst. Anschließend wird $\mathbf{U} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}$ durch Rücksubstitution gelöst

$$x_N = \frac{y_N}{\beta_{NN}} \quad (\text{F.7})$$

$$x_i = \frac{1}{\beta_{ii}} \left[y_i - \sum_{j=i+1}^N \beta_{ij} x_j \right] \quad \text{mit } i = N-1, N-2, \dots, 1. \quad (\text{F.8})$$

Da die Matrix \mathbf{A} und der Vektor der Zeilen-Perturbationen, beeinflusst von der Pivotisierung, nicht verändert werden, können diese zur Lösung verschiedener rechtsseitiger Vektoren \mathbf{b} verwendet werden. Der Lösungsvektor kann im rechtsseitigen Vektor abgespeichert werden, da auch hier die Elemente nicht mehrmals verwendet werden.

F.3.9. Subroutine *wrtout.f95*

Input / Output

Input zeitabhängiger Widerstand der aktuellen IP-Modellparameter, zeitabhängiger Widerstand der aktuellen Zelle aller Zeitpunkte, Anzahl der DC-Modelle, Nummer der aktuellen Zelle

Output

Aufbau

output filename Der Name der Ausgabedatei wird erzeugt.

output Der zeitabhängige Widerstands der aktuellen IP-Modellparameter und der gemessene zeitabhängige Widerstand der aktuellen Zelle wird für alle Zeitpunkte in *cell*.tdm* ausgeschrieben.

F.3.10. Subroutine *wrtout.f95*

Input / Output

Input aktuelle Senderpositionen, Koordinaten der Gitterpunkte in x-, y- und z-Richtung, Anzahl der Gitterzellen in x-, y- und z-Richtung, aktueller Parameters der Zellen (Gleichstromwiderstand, Aufladbarkeit, Relaxationszeit, Frequenzexponent oder Fehler), Kürzel des aktuellen IP-Modellparameters, Maximale Anzahl der Gitterzellen in x-, y- und z-Richtung

Output

Aufbau

Das Untergrundmodell des Gleichstromwiderstand, der Aufladbarkeit, der Relaxationszeit, des Frequenzexponenten oder des Fehlers werden in die Ausgabedatei *model*.mod* ausgeschrieben. Zudem wird das verwendete Gitter ausgegeben.

F.4. Input- und Output-Dateien

Der Aufbau und der Inhalt der verwendeten und erzeugten Dateien werden im Folgenden grundsätzlich und an einem Beispiel erläutert.

F.4.1. *start.ini* Dateinamen der DC-Modelle

Enthält

- Anzahl der DC-Modelle der einzelnen Zeitpunkte
- Namen der DC-Modelle der einzelnen Zeitpunkte

Beispiel mit 38 Zeitpunkten

start.ini

```
38 (Anzahl der DC-Modelle der einzelnen Zeitpunkte)
model6_10.mod (Name des DC-Modells des ersten Zeitpunkts)
model6_11.mod
:
model6_46.mod
model6_47.mod (Name des DC-Modells des letzten Zeitpunkts)
```

F.4.2. *model*.mod* DC-Modell des aktuellen Zeitpunkts

siehe E.4.10

F.4.3. *start.mod* IP-Werte des Startmodells

Enthält

- Startwerte für Gleichstromwiderstand, Aufladbarkeit, Relaxationszeit und Frequenzexponent

Beispiel mit 4 IP-Modellparametern

start.ini

```
10. (Startwert für Gleichstromwiderstand)
0.5 (Startwert für Aufladbarkeit)
0.5 (Startwert für Relaxationszeit)
0.5 (Startwert für Frequenzexponenten)
```

F.4.4. *cell*.tdm* Berechneter und gemessene zeitabhängige Widerstände

Enthält

- verwendete Zeitpunkte
- berechnete zeitabhängige Widerstände
- gemessene zeitabhängige Widerstände

Beispiel mit 38 Zeitpunkten***cell*.tdm***

#tp	#calc rho(t)	#meas rho(t)
(Zeitpunkt)	(berechneter zeitabhängiger Widerstand)	(gemessener zeitabhängiger Widerstand)
1	49.1503410339	49.6877021790
2	49.3759689331	49.6840515137
3	49.5986099243	49.7256584167
⋮		
36	58.0842666626	57.5681037903
37	58.2551803589	57.7523155212
38	58.4180564880	57.8414497375

**F.4.5. *model_r.mod*, *model_m.mod*, *model_t.mod*, *model_c.mod*
und *model_s.mod***
Enthält

- Anzahl der Zellen in x-, y-, z-Richtung
- Koordinaten der Eckpunkte der Gitterzellen
- Gleichstromwiderstand, Aufladbarkeit, Relaxationszeit, Frequenzexponent oder Fehler jeder Zelle

Beispiel mit einem homogenen Halbraum:***model_r.mod***

```

0  50 25 20 start modell (Anzahl der Zellen in x-, y-, z-Richtung )
0  0  0  0  0  0  ↙(x-Gitterkoordinaten)
-200.00 -103.00 -70.00 -58.00 -51.25 -48.75 -46.25 -43.75 -41.25 -38.75
-36.25 -33.75 -31.25 -28.75 -26.25 -23.75 -21.25 -18.75 -16.25 -13.75
-11.25 -8.75 -6.25 -3.75 -1.25 1.25 3.75 6.25 8.75 11.25
13.75 16.25 18.75 21.25 23.75 26.25 28.75 31.25 33.75 36.25
38.75 41.25 43.75 46.25 48.75 51.25 58.00 70.00 103.00 200.00
-100.00 -43.00 -32.00 -27.00 -20.00 -17.50 -15.00 -12.50 -10.00 -7.50
-5.00 -2.50 0.00 2.50 5.00 7.50 10.00 12.50 15.00 17.50
20.00 27.00 32.00 43.00 100.00 (y-Gitterkoordinaten)
0.00 1.25 2.50 4.00 5.50 7.14 8.79 10.60 12.40 14.38
16.35 18.52 20.69 22.86 25.43 30.64 36.34 50.00 150.00 200.00
10.00000 10.00000 ... insgesamt 94 (x-1) mal ... 10.00000
10.00000 10.00000 ... insgesamt 94 (x-1) mal ... 10.00000
      ⋮
      insgesamt 23 (z-1) mal
      ⋮
10.00000 10.00000 ... insgesamt 94 (x-1) mal ... 10.00000
10.00000 10.00000 ... insgesamt 94 (x-1) mal ... 10.00000

```

↖ (z-Gitterkoordinaten)
 ⋮
 Insgesamt 26 (y-1) mal
 ⋮

F.5. Variablen

Die verwendeten Variablen der einzelnen Routinen, ihre Bedeutung und das verwendete Format werden in diesem Abschnitt aufgelistet.

F.5.1. *IP3DInv_IP.f95*

Tabelle F.1.: Variablen der Routine *IP3DInv_IP.f95*

Name	Bedeutung	Format
c	Frequenzexponent der aktuellen Zelle	f
c3d	Frequenzexponent der Zellen	f
cha	Aufladbarkeit der aktuellen Zelle	f
cha3d	Aufladbarkeit der Zellen	f
im	Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung	i
imax	Maximale Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung	i
iq1, iq2	aktuelle Senderpositionen	i
jm	Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung	i
jmax	Maximale Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung	i
km	Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung	i
kmax	Maximale Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung	i
model	gewähltes IP-Modell	i
modfile	Namen der DC-Modelle der verschiedenen Zeitpunkte	a
ndmax	maximale Anzahl der DC-Modelle	i
nt	Anzahl der DC-Modelle	i
rho	Gleichstromwiderstand der aktuellen Zelle	f
rho3d	Gleichstromwiderstand der Zellen	f
rhos3d	zeitabhängiger Widerstand des aktuellen Zeitpunkts der Zellen	f
rho3dtime	zeitabhängiger Widerstand der einzelnen Zellen aller Zeitpunkte	f
rhotime	zeitabhängiger Widerstand der aktuellen Zelle aller Zeitpunkte	f
rms	Fehler der aktuellen Zelle	f
rms3d	Fehler der Zellen	f
tau	Relaxationszeit der aktuellen Zelle	f
tau3d	Relaxationszeit der Zellen	f
x	Koordinaten der Gitterpunkte in x-Richtung	f
y	Koordinaten der Gitterpunkte in y-Richtung	f
z	Koordinaten der Gitterpunkte in z-Richtung	f

F.5.2. *reaini.f95*

Tabelle F.2.: Variablen der Routine *reaini.f95*

Name	Bedeutung	Format
infile	Namen der DC-Modelle der verschiedenen Zeitpunkte	a
nmax	Maximale Anzahl der DC-Modelle	i
n	Anzahl der DC-Modelle	i

F.5.3. *read3d.f95*

Tabelle F.3.: Variablen der Routine *read3d.f95*

Name	Bedeutung	Format
im	Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung	i
imax	Maximale Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung	i
infile	Namen der DC-Modelle des aktuellen Zeitpunkts	a
iq1, iq2	aktuelle Senderpositionen	i
jm	Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung	i
jmax	Maximale Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung	i
km	Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung	i
kmax	Maximale Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung	i
rho	zeitabhängiger Widerstand der einzelnen Zellen des aktuellen Zeitpunkts	f
x	Koordinaten der Gitterpunkte in x-Richtung	f
y	Koordinaten der Gitterpunkte in y-Richtung	f
z	Koordinaten der Gitterpunkte in z-Richtung	f

F.5.4. *ip_inv.f95*

Tabelle F.4.: Variablen der Routine *ip_inv.f95*

Name	Bedeutung	Format
a	Sensitivitätsmatrix	f
ata	Produkt der Transponierten und der Sensitivitätsmatrix	f
atainv	rechtsseitiger Vektor / Lösungsvektor	f
atatmp	Produkt der Transponierten und der Sensitivitätsmatrix addiert mit β	f
β	Regularisierungsparameter	f
c	Frequenzexponent der aktuellen Zelle	f
cha	Aufladbarkeit der aktuellen Zelle	f
d	enthält ± 1 entsprechend der graden oder ungraden Anzahl der Zeilen-Permutationen	f
delta	logarithmischer Fehler	f
ic	Nummer der aktuellen Iteration	i
iend	Nummer der Iteration des kleinsten Fehlers	f
indx	enthält die Zeilen-Perturbation beeinflusst von der Pivotisierung	i
irho	Nummer der aktuellen Zelle	i
matrix	$(\mathbf{S}_{L-1}^T \mathbf{S}_{L-1} + \beta_L \cdot \mathbf{I})^{-1} \mathbf{S}_{L-1}$	f
model	gewähltes IP-Modell	i
modpar	IP-Werte der Startmodellparameter	f
npar	Anzahl der IP-Modellparameter	i
nt	Anzahl der DC-Modelle	i
rho	Gleichstromwiderstand der aktuellen Zelle	f
rhos	zeitabhängiger Widerstand der aktuellen IP-Modellparameter	f
rhotime	zeitabhängiger Widerstand der aktuellen Zelle aller Zeitpunkte	f
rms	Fehler der aktuellen Zelle	f
rmsold	Fehler der letzten Iteration der aktuellen Zelle	f
tau	Relaxationszeit der aktuellen Zelle	f
x	Modell-Update	f
xplog	logarithmische IP-Modellparameter	f

F.5.5. *readmo.f95*

Tabelle F.5.: Variablen der Routine *readmo.f95*

Name	Bedeutung	Format
modpar	IP-Werte der Startmodellparameter	f
npar	Anzahl der IP-Modellparameter	i

F.5.6. *jacoby.f95*

Tabelle F.6.: Variablen der Routine *jacoby.f95*

Name	Bedeutung	Format
a	Jacobi-Matrix	f
ic	Nummer der aktuellen Iteration	i
model	gewähltes IP-Modell	i
npar	Anzahl der IP-Modellparameter	i
nt	Anzahl der DC-Modelle	i
pxp	pertubierte, lineare IP-Modellparameter	f
rhos	zeitabhängiger Widerstand der aktuellen IP-Modellparameter	f
rhosc	zeitabhängiger Widerstand für den pertubierten Frequenzexponenten	f
rhosr	zeitabhängiger Widerstand für den pertubierten Gleichstromwiderstand	f
rhosm	zeitabhängiger Widerstand für die pertubierte Aufladbarkeit	f
rhost	zeitabhängiger Widerstand für die pertubierte Relaxationszeit	f
xp	lineare IP-Modellparameter	f
xplog	logarithmische IP-Modellparameter	f

F.5.7. *guppy.f95*

Tabelle F.7.: Variablen der Routine *guppy.f95*

Name	Bedeutung	Format
ar	Abszissenwert	f
c	pertubierter, linearer Frequenzexponent	f
cha	pertubierte, lineare Aufladbarkeit	f
filt	Filterkoeffizient	f
h	Kernel Funktion	c
i	Laufvariable	i
it	Zeitpunkt in ms	i
nf	Anzahl der Frequenzen (=21)	i
nt	Anzahl der Zeitpunkte	i
r	pertubierter, linearer Gleichstromwiderstand	f
rhos	zeitabhängiger Widerstand der aktuellen IP-Modellparameter	f
tau	pertubierte, lineare Relaxationszeit	f

F.5.8. *ludcmp.f95*

Tabelle F.8.: Variablen der Routine *ludcmp.f95*

Name	Bedeutung	Format
a	Matrix, welche in untere und obere Dreiecksmatrix zerlegt wird	f
aamax	Maximaler Betrag der Elemente von a	f
d	enthält ± 1 entsprechend der graden oder ungraden Anzahl der Zeilen-Permutationen	f
dum	Hilfsvariable	f
indx	enthält die Zeilen-Perturbation beeinflusst von der Pivottisierung	i
n	Anzahl der IP-Modellparameter	i
NMAX	maximale Dimension von vv	i
np	Anzahl der IP-Modellparameter	i
sum	Hilfsvariable	f
TINY	kleiner Wert nahe Null	f
vv	Skalierungsfaktor jeder Zeile	f

F.5.9. *lubksb.f95*Tabelle F.9.: Variablen der Routine *lubksb.f95*

Name	Bedeutung	Format
a	Matrix, welche in untere und obere Dreiecksmatrix zerlegt wird	f
b	input: rechtsseitiger Vektor; output: Lösungsvektor	f
indx	enthält die Zeilen-Perturbation beeinflusst von der Pivotisierung	i
n	Anzahl der IP-Modellparameter	i
np	Anzahl der IP-Modellparameter	i
sum	Hilfsvariable	f

F.5.10. *wrtout.f95*Tabelle F.10.: Variablen der Routine *wrtout.f95*

Name	Bedeutung	Format
dt	zeitabhängiger Widerstand der aktuellen Zelle aller Zeitpunkte	f
ft	zeitabhängiger Widerstand der aktuellen IP-Modellparameter	f
irho	Nummer der aktuellen Zelle	i
nt	Anzahl der DC-Modelle	i
outfile	Name des Output-Files	a

F.5.11. *wrt3dmod.f95*Tabelle F.11.: Variablen der Routine *wrt3dmod.f95*

Name	Bedeutung	Format
comment	Hilfsvariable	a
im	Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung	i
imax	Maximale Anzahl der Gitterzellen in x-Richtung	i
iq1, iq2	aktuelle Senderpositionen	i
jm	Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung	i
jmax	Maximale Anzahl der Gitterzellen in y-Richtung	i
km	Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung	i
kmax	Maximale Anzahl der Gitterzellen in z-Richtung	i
outfile	Name der Ausgabedatei	a
rho	Gleichstromwiderstand, Aufladbarkeit, Relaxationszeit, Frequenzexponent oder Fehler der Zellen	f
var	Kürzel des aktuellen IP-Modellparameters	a
x	Koordinaten der Gitterpunkte in x-Richtung	f
y	Koordinaten der Gitterpunkte in y-Richtung	f
z	Koordinaten der Gitterpunkte in z-Richtung	f

Abbildungsverzeichnis

2.1.	(a) Der zeitliche Verlauf des anregenden alternierenden Gleichstroms I ist skizziert. (b) Dargestellt ist der entsprechende zeitliche Verlauf der resultierenden Spannung $U(t)$ oberhalb eines polarisierbaren Untergrunds (BerktoId et al., 2005).	8
2.2.	Elektrische Doppelschicht eines Tonminerals bestehend aus einer negativen Schicht an der Mineraloberfläche und einer angrenzenden positiven Schicht im Elektrolyt (nach BerktoId et al., 2005; Wienberg, 1990).	9
2.3.	indention=1em	10
2.4.	Ionenkonzentration eines Elektrolyts mit Tonpartikeln ohne und mit anliegendem Gleichstrom (BerktoId et al., 2005; Schön, 1983).	10
2.5.	Ungehinderter und durch ein Mineralkorn gehinderter elektrischer Fluss im Elektrolyt (BerktoId et al., 2005; Schön, 1983).	11
2.6.	(a) Ersatzschaltbild nach Cole and Cole (1941) zur qualitativen Beschreibung des IP-Effekts des in (b) skizzierten Gesteins (nach Pelton et al., 1978).	12
2.7.	Prinzip einer Widerstandsmessung mittels Vierpunktanordnung. Die Positionen der Sendelektroden, welche einen Strom I einspeisen, sind durch A und B und die der Potentialelektroden, welche eine Potentialdifferenz ΔV messen, durch M und N gekennzeichnet. Die Stromlinien sind durch Linien mit Pfeilen und die Potentiallinien durch Linien dargestellt (BerktoId et al., 2005).	13
2.8.	Skizziert ist eine Gradientenauslage mit einem Sender und sieben Empfängern. . .	14
2.9.	Beispielhaft ist ein Abfall der Spannung nach dem Abschalten des Stroms dargestellt (BerktoId et al., 2005; Sumner, 1976).	14
2.10.	Der frequenzabhängige Widerstand ρ und die Phase Φ sind schematisch nach dem Modell von Cole-Cole dargestellt (BerktoId et al., 2005).	17
2.11.	Dargestellt ist der relative IP-Effekt über einem zweischichtigen horizontalen Untergrund. h_1 ist die Mächtigkeit der Deckschicht und $AB/2$ die Auslagenweite einer Schlumberger-Anordnung. Einer nicht polarisierbaren Deckschicht folgt ein polarisierbarer homogener Halbraum (BerktoId et al., 2005; Bertin and Loeb, 1976). . .	20
2.12.	Für eine sogenannte Pseudosektion werden die Messwerte in einer zweidimensionalen räumlichen Verteilung dargestellt. An den Schnittpunkten der Linien, welche mit einer Steigung von 45° von den Zentren der Dipole ausgehen, werden die Messwerte aufgetragen.	21
2.13.	Die schwarze Linie markiert den Verlauf des zeitabhängigen Widerstands gemessen oberhalb eines homogenen Halbraums. Für ein um 100% erhöhtes τ (blau), ein um 50% erniedrigtes τ (grün) und ein um 50% erniedrigtes c (lila) sind die Transienten dargestellt.	21

3.1.	Skizziert ist das dreidimensionale Finite-Differenzen-Gitter zur Veranschaulichung der Nutzung der Indizes (i,j,k) , Zelleitfähigkeiten $(\sigma^e_{i,j,k})$ und Gitterpunktabständen (f,g,h) (verändert nach Spitzer, 1995).	28
3.2.	Verwendete Elektrodenpositionen für die Modellstudien und Messung in Krauthausen. Die Elektrodenpositionen der in Kapitel 3.2.1 verwendeten Transienten sind mit ausgefüllten Symbolen markiert (1. ■, 10. ▼, 100. ▲, 1883. ●).	33
3.3.	Dargestellt ist die berechnete Verteilung des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ im Untergrund für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms (a - c) und für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms (d - f). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Das IP-Modell ist ein homogener Halbraum mit $\rho = 1 \Omega\text{m}$, $m=500 \frac{\text{mV}}{\text{V}}$, $\tau=0,5$ s und $c=0,5$.	34
3.4.	Aufgetragen ist der Betrag des k-Faktors gegen die Transientennummer aller verwendeten Sender-Empfänger-Kombinationen. Diese sind in 4 Gruppen unterteilt. Besonders gekennzeichnet sind der 1. ■, 10. ▼, 100. ▲ und 1883. ● Transient. Linien trennen die Gruppen A, B, C und D.	35
3.5.	Die für den homogenen Halbraum berechneten Transienten der 1., 10., 100. und 1883. Sender-Empfänger-Kombination sind durch Linien dargestellt. Für jede Kombination ist der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} durch eine gestrichelte Linie gekennzeichnet. Für 10, 54, 398, 857, 1847 und 3414 ms sind zudem die analytisch berechneten zeitabhängigen Widerstände mit den entsprechenden Symbolen eingezeichnet.	36
3.6.	Dargestellt ist die Verteilung des berechneten zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ im Untergrund für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms (a - c) und für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms (d - f). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Das zugrunde liegende IP-Modell ist in Tabelle 3.3 zu finden.	38
3.7.	In einer Aufsicht (a) sind alle genutzten Elektrodenkombinationen und die Lage der Blöcke gekennzeichnet, wobei die Positionen der großen Auslagen oberhalb beider Blöcke der in (b) gezeigten Transienten hervorgehoben sind. (b) Dargestellt sind die berechneten Potentialdifferenzen ΔV gegen die Zeit t . Für den Transienten der Sender-Empfänger-Kombination bei -10 m sind 5%ige Fehlerbalken eingezeichnet.	39
3.8.	(a) Gekennzeichnet sind alle genutzten Elektrodenpositionen, wobei die Positionen der den linken Block überdeckenden Sender-Empfänger-Kombinationen der in (b) verwendeten Transienten hervorgehoben sind. (b) Dargestellt ist die Potentialdifferenz ΔV gegen die Zeit t für ausgewählte Sender-Empfänger-Kombinationen. Für den Transienten der Sender-Empfänger-Kombination bei -10 m sind 5%ige Fehlerbalken eingezeichnet.	40
3.9.	(a) Gekennzeichnet sind alle genutzten Elektrodenpositionen, wobei die Positionen der den rechten Block überdeckenden Sender-Empfänger-Kombinationen der in (b) verwendeten Transienten hervorgehoben sind. (b) Dargestellt ist die Potentialdifferenz ΔV gegen die Zeit t für ausgewählte Sender-Empfänger-Kombinationen. Für den Transienten der Sender-Empfänger-Kombination bei -10 m sind 5%ige Fehlerbalken eingezeichnet.	41

4.1. (a-i) Die Verteilung des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms ist für Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ dargestellt. In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. (j-l) QQ-Plot der Inversion des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ	58
4.2. Inversionsergebnis des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms (a-c) und für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms (d-f). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Die Verteilung der normierten Coverage ist in der dritten Zeile abgebildet (g-i). Drei beispielhafte Transienten finden sich in Zeile vier (j-l). Die gemessenen Daten sind mit Punkten und die Modellantwort mit Linien dargestellt.	60
4.3. Inversionsergebnis des Gleichstromwiderstands ρ_{dc} (a-c), der Aufladbarkeit m (d-f), der Relaxationszeit τ (g-i) und des Frequenzexponenten c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Drei zusammengesetzte Zelltransienten (Punkte) und die berechneten Zelltransienten (durchgezogene Linie) sind in (m-o) abgebildet.	62
4.4. (a-i) Die Verteilung des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms ist für Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ dargestellt ($\beta = \gamma = 1$). In der ersten Spalte ist ein Ausschnitt des inneren Modellraums abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. (j-l) QQ-Plot der Inversion des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ	64
4.5. Dargestellt als Punkte ist der Glättungsterm gegen den Term der Datenanpassung für die fünfte Iteration der Inversionen verschiedener Regularisierungsparameter, welche mit zwei Geraden angepasst wurden.	65
4.6. Inversionsergebnis des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms (a-c) und für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms (d-f). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Die Verteilung der normierten Coverage des letzten Zeitpunkts ist in der dritten Zeile abgebildet (g-i). Sechs beispielhafte Transienten finden sich in Zeile vier und fünf (j-o).	66
4.7. Verteilung der IP-Modellparameter des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet. . . .	68

4.8. Verteilung der IP-Modellparameter des Madden-Cantwell-Modells ($c = 0, 25$). Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet.	70
5.1. Auf der tektonischen Übersichtskarte der Niederrheinischen Bucht ist die Lage des Testfelds Krauthausen mit einem roten Punkt markiert (Walter, 1992).	74
5.2. Lithologisches Normalprofil des Testfelds in Krauthausen (Blaschek, 2006; Höpner, 2001)	75
5.3. Geologisches Profil durch die Niederrheinische Bucht von SW nach NO. Die Projektion des Testfelds Krauthausen ist mit einem roten Punkt markiert (Walter, 1992).	76
5.4. Lage der Messpunkte von Gößling (2004) (schwarze Linien), Nix (2005) (grüne Punkte), Blaschek (2006) und Hördt et al. (2007) (magentafarbene Linie) sowie der Messung 2012 im Rahmen dieser Arbeit (blaue Linien).	77
5.5. 2D Inversionsergebnis des Längsprofils der Geoelektrischen-Tomographie-Messung aus dem Jahr 2002 und Ergebnisse mittels der Direct-Push-Methode durchgeführter Messungen des spezifischen Widerstands (Gößling, 2004). Die Lage des Längsprofils stimmt mit Profil 2 in Abbildung 5.4 überein.	78
5.6. 2D Inversionsergebnis des spezifischen Widerstands der Radiomagnetotellurik-Messung aus dem Jahr 2002 (Nix, 2005). Die Lage der schwarzen Punkte stimmt mit Profil 2 in Abbildung 5.4 überein.	78
5.7. Dargestellt ist das 2D Inversionsergebnis der SIP-Messung für Profil 32. Oben: \log_{10} der Magnitude der Leitfähigkeit. Unten: Phase (Hördt et al., 2007). Die Lage des Profils 32 stimmt mit Profil 1 in Abbildung 5.4 überein.	79
5.8. Dargestellt ist das 2D Inversionsergebnis der Cole-Cole-Parameter der SIP Messung für alle Frequenzen für Profil 32. Oben, links: ρ_{dc} [\log_{10} , Ωm]. Oben, rechts: m [$\frac{\text{V}}{\text{V}}$]. Unten, links: τ [\log_{10} , s]. Unten, rechts: c (Blaschek, 2006). Die Lage des Profils 32 stimmt mit Profil 1 in Abbildung 5.4 überein.	80
5.9. Links: Foto des <i>Terrameter LS</i> und zweier Autobatterien. Rechts: Der verwendete Messaufbau bestehend aus dem <i>Terrameter LS</i> , zwei Autobatterien, zwei Multielektrodenkabeln und 41 Elektroden, welche durch Jumper-Kabel an den Multielektrodenkabeln angeschlossen sind.	81
5.10. a) Verwendete Elektroden für die erste und dritte Messreihe: Edelstahlelektroden (magenta); b) Verwendete Elektroden für die zweite Messreihe: 10 Edelstahlelektroden wurden durch nicht-polarisierbare Elektroden ersetzt und mit Bentonit angekoppelt (grün).	83
5.11. a) Beispiel einer Elektrodenkombination für die sich nur die Zeitreihe der ersten Messreihe von denen der anderen unterscheidet; b) Beispiel einer Elektrodenkombination für die alle drei Zeitreihen nahezu identisch sind.	83
5.12. (a) Foto des Messgebiets entlang Profil 1 vom Ende in Richtung Profilanfang. (b) Blick entlang des Profils 3 vom Mittelpunkt Richtung Endpunkt. Die Bohrlokationen sind mit weißen Rohren verschlossen.	84

5.13. (a) Gemessene, unbearbeitete Zeitreihe der 1279. Sender-Empfänger-Kombination $\Delta V(t)$, welche sieben Transienten enthält, (blau) und die Stromfunktion $I(t)$ (rot). (b) Der prozessierte Einschalt-Transient der 1279. Sender-Empfänger-Kombination in logarithmisch-äquidistanten Zeitabständen mit der Standardabweichung der einzelnen Zeitpunkte.	86
5.14. (a) Gemessene, unbearbeitete Zeitreihe der 1279. Sender-Empfänger-Kombination $\Delta V(t)$, welche sieben Transienten enthält, (blau) und die auf die Stromstärke normierte Zeitreihe $\Delta V(t)$ (rot). (b) Gefilterte Zeitreihe der 1279. Sender-Empfänger-Kombination $\Delta V(t)$ in rot und normierte Zeitreihe $\Delta V(t)$ in blau.	88
5.15. (a) Gefilterte Zeitreihe $\Delta V(t)$ (blau) und die gelevelte Zeitreihe $\Delta V(t)$ (rot). (b) Sieben Einzel-Transienten der Zeitreihe nach dem Zerschneiden der Zeitreihe $\Delta V(t)$	90
5.16. Gestapelter Transient $\Delta V(t)$ (rot, fett) und die berechnete Standardabweichung (hellrot) aller Zeitpunkte bei (a) der Verwendung aller sieben Einzel-Transienten $\Delta V_n(t)$ und bei (b) der Verwendung der Einzel-Transienten $\Delta V_n(t)$ 1 und 4-7. Die Einzel-Transienten $\Delta V_n(t)$ sind als dünne Linien eingezeichnet.	91
5.17. Gemessene unbearbeitete Zeitreihe $\Delta V(t)$ (blau) und Stromfunktion $I(t)$ (rot) für (a) die 33. Sender-Empfänger-Kombination und (b) die 147. Sender-Empfänger-Kombination. Prozessierter Transient $\Delta V(t)$ (rot) und die berechnete Standardabweichung (hellrot) aller Zeitpunkte für (c) die 33. Sender-Empfänger-Kombination und für (d) die 147. Sender-Empfänger-Kombination.	92
5.18. Gekippte Ansicht der ρ_a -Pseudosektion des Profils 8 für alle scheinbaren Widerstände des letzten Zeitpunkts 3414 ms aller verwendeten Sender-Empfänger-Kombinationen.	93
5.19. Dargestellt als Punkte sind der Term Φ_m , welcher die Ähnlichkeit zum Startmodell belohnt, gegen den Term der Datenanpassung Φ_d für die vierte Iteration der Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern β , welche mit zwei Geraden angepasst wurden.	94
5.20. (a-i) Dargestellt ist der zeitabhängige Widerstand $\rho(t)$ für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms für Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern β . In der ersten Zeile ist das Ergebnis für $\beta = 1$, in der zweiten für $\beta = 25$ und in der dritten für $\beta = 100$ dargestellt. In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. (j-l) QQ-Plot der Inversion des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Regularisierungsparametern β	95
5.21. (a-i) Dargestellt ist der zeitabhängige Widerstand $\rho(t)$ für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms für Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ . In der ersten Zeile ist das Ergebnis für $\lambda = 1$, in der zweiten für $\lambda = 10$ und in der dritten für $\lambda = 100$ dargestellt. In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. (j-l) QQ-Plot der Inversion des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Regularisierungsparametern λ	97
5.22. Dargestellt als Punkte sind der Glättungsterm Φ_m gegen den Term der Datenanpassung Φ_d für die dritten Iteration der Inversionen verschiedener Regularisierungsparameter λ , welche mit zwei Geraden angepasst wurden.	98

5.23. (a - f) Dargestellt ist der zeitabhängige Widerstand $\rho(t)$ für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms für Inversionen mit verschiedenen Regularisierungsparametern γ . In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=0$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. (g - h) QQ-Plot der Inversion des letzten verwendeten Zeitpunkts 3414 ms mit verschiedenen Regularisierungsparametern γ	99
5.24. (a - f) Dargestellt ist der zeitabhängige Widerstand $\rho(t)$ für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms für Inversionen mit verschiedenen Startmodellen (homogener Halbraum (a - c), a priori Modell (d - f)). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Die Coverage der 19. Iteration ist für die Inversion mit homogenem Halbraum in (g - i) und mit dem a priori Modell als Startmodell in (j - l) dargestellt.	101
5.25. Inversionsergebnis des zeitabhängigen Widerstands $\rho(t)$ für den ersten verwendeten Zeitpunkt 10 ms (a - c) und für den letzten verwendeten Zeitpunkt 3414 ms (d - f). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Die relative Differenz der Inversionsergebnisse findet sich in (g - i). Drei gemessene Transienten und die zugehörigen berechneten Transienten sind in (j - l) abgebildet.	103
5.26. Verteilung des Gleichstromwiderstands des Cole-Cole-Modells. (a) zeigt die Widerstände der ersten Schicht. In (b) sind alle Widerstände größer als 200 Ω m eingeblendet. Alle Widerstände zwischen 100 und 200 Ω m sind in (c) abgebildet. Die Widerstände kleiner als 100 Ω m sind entsprechend der Tiefe in (d) eingeblendet. .	104
5.27. Verteilung der IP-Modellparameter des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a - c), die Aufladbarkeit m (d - f), die Relaxationszeit τ (g - i) und der Frequenzexponent c (j - l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y= -10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m - o) abgebildet. . . .	105
5.28. Dargestellt ist die Verteilung der Cole-Cole-Parameter im Untergrund. Für das Profil 1 sind in der ersten Spalte und für Profil 2 in der zweiten Spalte in (a - b) der Gleichstromwiderstand, in (c - d) die Aufladbarkeit, in (e - f) die Relaxationszeit und in (g - h) der Frequenzexponent abgebildet.	107
5.29. Dargestellt ist das Ergebnis der Inversion mit <i>RES2DINV</i> für den Gleichstromwiderstand und die Aufladbarkeit für Profil 1. Profilmeter 20 entspricht Profilmeter -31,25 in Abbildung 5.28 und Profilmeter 82,5 entspricht Profilmeter 31,25 in Abbildung 5.28.	108
B.1. Verteilung der IP Modellparameter des Warburg Modells ($c = 0,5$) mit einem durchschnittlichen $RMS = 1,52\%$. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet.	122

B.2.	Verteilung der IP Modellparameter des Debye Modells ($c = 1$) mit einem durchschnittlichen $RMS = 5,56\%$. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet.	123
C.1.	Verteilung der IP Modellparameter des Madden-Cantwell Modells. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet. . . .	126
C.2.	Verteilung der IP Modellparameter des Warburg Modells. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet. . . .	127
C.3.	Verteilung der IP Modellparameter des Debye Modells. Dargestellt sind der Gleichstromwiderstand ρ_{dc} (a-c), die Aufladbarkeit m (d-f), die Relaxationszeit τ (g-i) und der Frequenzexponent c (j-l). In der ersten Spalte ist der innere Modellraum abgebildet, in der zweiten Spalte ein vertikaler Schnitt bei $y=-10$ m und in der dritten Spalte ein horizontaler Tiefenschnitt bei $z=5$ m. Drei zusammengesetzte Zelltransienten und die berechneten Zelltransienten sind in (m-o) abgebildet.	128
C.4.	Verteilung des Gleichstromwiderstands des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind Vertikalschnitte bei $y=10, 0$ und -10 m und Horizontalschnitte bei $z=1, 3, 5, 7, 9, 11$ und 13 m. Der RMS der IP-Inversion beträgt $0,57\%$	129
C.5.	Verteilung die Aufladbarkeit des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind Vertikalschnitte bei $y=10, 0$ und -10 m und Horizontalschnitte bei $z=1, 3, 5, 7, 9, 11$ und 13 m. Der RMS der IP-Inversion beträgt $0,57\%$	130
C.6.	Verteilung der Relaxationszeit des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind Vertikalschnitte bei $y=10, 0$ und -10 m und Horizontalschnitte bei $z=1, 3, 5, 7, 9, 11$ und 13 m. Der RMS der IP-Inversion beträgt $0,57\%$	131
C.7.	Verteilung des Frequenzexponenten des Cole-Cole-Modells. Dargestellt sind Vertikalschnitte bei $y=10, 0$ und -10 m und Horizontalschnitte bei $z=1, 3, 5, 7, 9, 11$ und 13 m. Der RMS der IP-Inversion beträgt $0,57\%$	132
D.1.	Aufbau des Programms <i>For3DIP</i>	134
E.1.	Aufbau des Programms <i>IP3DInv_{DC}</i>	155
F.1.	Aufbau des Programms <i>IP3DInv_{IP}</i>	178

Tabellenverzeichnis

2.1. Integrierte Aufladbarkeit von Gesteinen und Mineralen. Die Ladenzeiten der einzelnen Messungen sind Telford et al. (1990) zu entnehmen.	16
3.1. Abszissenwerte und Filterkoeffizienten des verwendeten Filters nach Guptasarma (1982).	24
3.2. Gemittelte, prozentuale Abweichung der Potentialdifferenz zur analytischen Lösung für die vier Gruppen A - D und alle Transienten, der gewichtete Mittelwert für ausgewählte Zeitpunkte und der Mittelwert aller Zeitpunkte.	37
3.3. Parameter des IP-Modell für den Hintergrund und beide verwendeten Blöcke . . .	39
5.1. Verteilung des Widerstands ρ in den Modellen aus Gößling (2004), Nix (2005), Hördt et al. (2007) und Blaschek (2006). Die Oberkante der Schicht s wird mit d_s [m] und der Widerstand der Schicht mit ρ_s [Ω m] bezeichnet.	100
5.2. Verteilung des Widerstands ρ für Profil 2. Die Oberkante der s -ten Schicht wird mit d_s [m] und der Widerstand der Schicht mit ρ_s [Ω m] bezeichnet.	111
A.1. Verwendete Variablen, ihre Bedeutung und Einheit	117
D.1. Variablen der Routine <i>for3DIP.f95</i>	149
D.2. Variablen der Routine <i>guppy.f95</i>	150
D.3. Variablen der Routine <i>dreid.f95</i>	150
D.4. Variablen der Routine <i>dirichlet.f95</i>	151
D.5. Variablen der Routine <i>sym.f95</i>	151
D.6. Variablen der Routine <i>cgpc.f95</i>	151
D.7. Variablen der Routine <i>skal.f95</i>	152
D.8. Variablen der Routine <i>ab.f95</i>	152
D.9. Variablen der Routine <i>eqsolv.f95</i>	152
E.1. Variablen der Routine <i>IP3DInv_{DC}.f95</i>	171
E.2. Variablen der Routine <i>readin.f95</i>	173
E.3. Variablen der Routine <i>wrt_{dat}.f95</i>	174
E.4. Variablen der Routine <i>wrtrms.f95</i>	174
E.5. Variablen der Routine <i>wrtrms.f95</i>	174
E.6. Variablen der Routine <i>choldc.f95</i>	174
E.7. Variablen der Routine <i>cholsl.f95</i>	175
E.8. Variablen der Routine <i>wrtmod.f95</i>	175
F.1. Variablen der Routine <i>IP3DInv_IP.f95</i>	189
F.2. Variablen der Routine <i>reaini.f95</i>	189
F.3. Variablen der Routine <i>read3d.f95</i>	189

F.4. Variablen der Routine <i>ip_inv.f95</i>	190
F.5. Variablen der Routine <i>readmo.f95</i>	190
F.6. Variablen der Routine <i>jacoby.f95</i>	191
F.7. Variablen der Routine <i>guppy.f95</i>	191
F.8. Variablen der Routine <i>ludcmp.f95</i>	191
F.9. Variablen der Routine <i>lubksb.f95</i>	192
F.10. Variablen der Routine <i>wrtout.f95</i>	192
F.11. Variablen der Routine <i>wrt3dmod.f95</i>	192

Literaturverzeichnis

- Berkthold, A., Büttgenbach, T., Greinwald, S., Illich, B., Jacobs, F., Kolodziey, A. W., Lange, G., Maurer, H.-M., Prácer, E., Pfeifer, B., Pretzschner, C., Radic, T., Schaumann, G., Rezessy, G., Sebulke, J., Seidel, K., Szabadvary, L., Vértesy, L., Vogt, R., Weidelt, P., Weller, A., and Wolff, U. (2005). Geoelektrik. In Knödel, K., Krummel, H., and Lange, G., editors, *Geophysik*, chapter 5, pages 71–387. Springer, Berlin, Heidelberg.
- Bertin, J. and Loeb, J. (1976). Experimental and theoretical aspects of induced polarizations. In *Presentation and application of the IP method - case historie*, volume 1. Borntraeger, 1 edition.
- Blaschek, R. (2006). *Aspekte der Inversion von Daten der Spektralen Induzierten Polarisation*. PhD thesis, Universität zu Bonn, Deutschland.
- Cole, K. S. and Cole, R. H. (1941). Dispersion and absorption in dielectrics. 1. Alternating current fields. *J. Chem. Phys.*, (9):341.
- Dahlin, T. and Leroux, V. (2012). Improvement in time-domain induced polarization data quality with multi-electrode systems by separating current and potential cables. *Near Surface Geophysics*, 10(6):545–565.
- Dahlin, T., Leroux, V., and Nissen, J. (2002). Measuring techniques in induced polarisation imaging. *Journal of Applied Geophysics*, 50:279–298.
- Dakhnov, V. N. (1959). The application of geophysical methods: Electrical well logging. Technical report, Moscow Petroleum Institute.
- De Groot-Hedlin, C. and Constable, S. (1990). Occam’s Inversion to generate smooth, twodimensional Mmodels for Magnetotelluric Data. *Geophysics*, pages 1613–1624.
- De Lugao, P. P. and Wannamaker, P. E. (1996). Calculating the two-dimensional magnetotelluric jacobian in finite elements using reciprocity. *Geophysical J. Int.*, pages 806–810.

- Dias, C. A. (2000). Developments in a model to describe low-frequency electrical polarization of rocks. *Geophysics*, 65(2):437–451.
- Gazoty, A., Fiandaca, G., Pedersen, J., Auken, E., and Christiansen, A. (2012). Mapping of landfills using time-domain spectral induced polarization data: the Eskelund case study. *Near Surface Geophysics*, (10):575–586.
- Guillen, D. P. and Hertzog, R. C. (2004). A survey of Department of Energy-sponsored geophysical research for shallow waste site characterization. *Vadose zone Journal* 3, pages 122–133.
- Guptasarma, D. (1982). Computation of the time-domain response of a polarizable ground. *Geophysics*, 47(11):1574–1576.
- Göbbling, K. (2004). Geoelektrische Tomographie zur Überwachung eines Tracerversuchs auf dem Testfeld Krauthausen. Master’s thesis, Universität zu Köln.
- Günther, T. (2004). *Inversion Methods and Resolution Analysis for the 2D/3D Reconstruction of Resistivity Structures from DC Measurements*. PhD thesis, Technische Universität Bergakademie Freiberg, Deutschland.
- Helwig, S. L. (2000). *Vibrotem*. PhD thesis, Universität zu Köln, Deutschland.
- Hönig, M. (2002). *Entwicklung und Anwendung von Auswertalgorithmen für die Induzierte Polarisation im Zeitbereich in bis zu drei Dimensionen*. PhD thesis, Universität zu Köln, Deutschland.
- Hönig, M. and Tezkan, B. (2007). 1d and 2d cole-cole-inversion of time-domain induced-polarization data. *Geophysical Prospecting*, 55:117–133.
- Höpner, F. (2001). Numerische Modellierungen von Stofftransport im Grundwasser unter Verwendung geoelektrischer und hydraulischer Daten. Master’s thesis, RWTH Aachen.
- Hördt, A. (1998). Calculation of electromagnetic sensitivities in the time domain. *Geophysical J. Int.*, 133:713–720.
- Hördt, A., Blaschek, R., Kemna, A., and Zisser, N. (2007). Hydraulic conductivity estimation from induced polarisation data at the field scale - the Krauthausen case history. *Journal of Applied Geophysics*, 62:33–46.
- Hördt, A., Hanstein, T., Hönig, M., and Neubauer, F. M. (2006). Efficient spectral ip-modelling in the time domain. *Journal of Applied Geophysics*, 59:152–161.

- Kemna, A. (2000). *Tomographic inversion of complex resistivity: theory and application*. PhD thesis, Ruhr-Universität Bochum.
- Kemna, A., Binley, A., Cassiani, G., Niederleithinger, E., Revil, A., Slater, L., Williams, K. H., Orozco, A. F., Haegel, F.-H., Hördt, A., Kruschwitz, S., Leroux, V., Titov, K., and Zimmermann, E. (2012). An overview of the spectral induced polarization method for near-surface applications. *Near Surface Geophysics*, (10):453–468.
- Kenkel, J., Hördt, A., and Kemna, A. (2012). 2D modelling of induced polarization data with anisotropic complex conductivities. *Near Surface Geophysics*, (10):533–544.
- Li, Y. and Oldenburg, D. W. (2000). 3-D inversion of induced polarization data. *Geophysics*, pages 1931–1945.
- Loke, M. H. and Barker, R. D. (1996). Rapid least squares inversion of apparent resistivity pseudosections by a quasi-Newton method. *Geophys. Prospecting*, (152):131–152.
- Mackie, R., Rodi, W., and Rieven, S. (1997). *Users Manual and Software Documentation for Two-Dimensional Inversion of Magnetotelluric Data*. GSY-USA, Inc., San Francisco, California 94114.
- Marquardt, D. (1963). An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 11:431–441.
- Marshall, D. J. and Madden, T. R. (1959). Induced polarization, a study of its causes. *Geophysics*, 24(4):790–816.
- Nix, B. (2005). Radimeagnetotellurik-Messungen zur räumlichen und zeitlichen Auflösung eines Grundwasser-Tracers. Master’s thesis, Universität zu Köln.
- Oldenburg, D. W. and Li, Y. (1994). Estimating the Depth of Investigation in DC resistivity and IP surveys. *Geophysics*, (64):403–416.
- Pelton, W., Ward, S. H., Hallof, P., Sill, W. R., and Nelson, P. (1978). Mineral discrimination and removal of inductive coupling with multifrequency IP. *Geophysics*, (43):588–609.
- Portniaguine, O. and Zhadanov, M. S. (1999). Focussing geophysical inversion images. *Geophysics*, 64:874–887.

- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Flannery, B. P., and Vetterling, W. T. (1992). *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press.
- Rühlow, A., Tezkan, B., and Lima, O. L. D. (1999). DC resistivity and time-domain induced polarization survey for the study of groundwater contamination in bahia, brazil. *EEGS*, (3):143–159.
- Schlumberger, C. (1922). *Etudes sur la prospection électrique du soul sol*. Gauthier-Villars, Paris.
- Scholl, C. (2001). Die Periodizität von Sendesignalen bei Long-Offset Transient Electromagnetics. Master's thesis, Universität zu Köln.
- Schwarz, H. R., editor (1991). *Methode der finiten Elemente*. Teubner.
- Schön, J. (1983). *Petrophysik - Physikalische Eigenschaften von Gesteinen und Mineralen*. Enke Stuttgart.
- Seigel, H. and Howland-Rose, A. W. (1990). Magnetic induced-polarization method. In Fink, J. B., Sternberg, B. K., Mc Alister, E. O., Wieduwilt, W. G., and Ward, S. H., editors, *Induced polarization, applications and case histories*, pages 23–56. Society of Exploration Geophysicists.
- Seigel, H. O. (1959). Mathematical formulation and type curves for induced polarization. *Geophysics*, 24(3):547–565.
- Spitzer, K. (1995). A 3-D finite-difference algorithm for DC resistivity modelling using conjugate gradient methods. *Geophys. J. Int.*, pages 903–914.
- Sumner, J. S. (1976). *Principles of induced polarization for geophysical exploration. Developments in economics*. Elsevier Amsterdam.
- Telford, W. M., Geldart, L. P., and Sheriff, R. (1990). *Applied Geophysics*. Cambridge University Press, 2 edition.
- Vanhala, H., Soininen, H., and Kukkonen, I. (1992). Detecting organic chemical contaminants by spectral-induced polarization method on glacial till environment. *Geophysics*, (57):1014–1017.
- Vereecken, H., Döring, U., Hardelauf, H., Jaekel, U., Hashagen, U., Neuendorf, O., Schwarze, H., and Seidemann, R. (2000). Analysis of solute transport in a heterogeneous aquifer: the Krauthausen field experiment. *Journal of Contaminant Hydrology*, 45:329–358.

- Walter, R. (1992). *Geologie von Mitteleuropa*. Number
www.schweizerbart.de/9783510652259. E. Schweizerbart'sche Verlagsbuch-
handlung.
- Weller, A. and Börner, F. D. (1996). Measurements of spectral induced polarization
for environmental purposes. *Environmental Geology*, (27):329–334.
- Weller, A., Seichter, M., and Kampke, A. (1996). Induced-polarization model-
ling using complex electrical conductivities. *Geophysical Journal International*,
127:378–398.
- Wienberg, R. (1990). Zum Einfluß organischer Schadstoffe auf Deponietone, Teil 1:
Unspezifische Interaktionen, Teil 2: Spezifische Interaktionen. *Abfallwirtschafts-
Journal* 2, 59:222–230.
- Yi, M. J., Kim, J. H., and Chung, S. H. (2003). Enhancing the resolving power of
least squares inversion with active constraint balancing. *Geophysics*, 68:931–941.
- Yuval and Oldenburg, D. (1997). Computation of Cole-Cole parameters from IP
data. *Geophysics*, 62:436–448.

Danksagung

Vielen Menschen gebührt mein Dank für die Unterstützung beim Erstellen dieser Arbeit:

Prof. Dr. Bülent Tezkan danke ich für die Betreuung dieser Arbeit, das Ermöglichen zahlreicher Messungen an vielen Orten der Welt und die Unterstützung während meines Studiums. Für die Zweitkorrektur und für die Betreuung im Rahmen meines Studiums möchte ich Prof. Dr. Joachim Saur danken.

Die Messung im Jahr 2012 wäre ohne das *Terrameter LS* der Universität Lund und die sehr gute Einweisung und Einarbeitung durch Prof. Dr. Torleif Dahlin nicht möglich gewesen. Für die Unterstützung möchte ich mich sehr herzliche Bedanken! Für das Ausleihen diversen Zubehörs danke ich Marcus Gurk, der Universität Münster und der Universität Bonn. Mein Dank gilt ebenso dem Forschungszentrum Jülich für die Messerlaubnis auf dem Testfeld Krauthausen.

Für ihre Hilfe während der Messung danke ich Rainer Bergers, Martin Biolik, Andreas Busse, Amir Haroon, Jan Köhler, Klaus Lippert, Daniel Steinbach und Jan Wittke.

Für viel hilfreiche Tipps und Anregungen beim Anfertigen dieser Arbeit gilt mein Dank Juliane Adrian, Amir Haroon, Johanna Hauser, Anne Schreiner und Wiebke Mörbe.

Für die schöne Zeit danke ich meinen Bürokollegen Juliane Adrian, Amir Haroon, Anne Schreiner und im weiteren Sinne Oliver Hartkorn, Fabrizio Musacchio, Mitch von Papen und Jan Wittke. Mein Dank umfasst natürlich auch komplett beide Arbeitsgruppen des Instituts.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) danke ich für die finanzielle Unterstützung im Rahmen der Projekte TE 170/13-1 und 13-2 “Entwicklung und Anwendung eines neuen Inversionsprogramms für die induzierte Polarization im Zeitbereich in drei Dimensionen”.

Meiner Familie und meinen Freunden kann ich nicht genug für Alles danken!

Versicherung

Ich versichere, dass ich die von mir vorgelegte Dissertation selbständig angefertigt, die benutzten Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben und die Stellen der Arbeit - einschließlich Tabellen, Karten und Abbildungen -, die anderen Werken im Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, in jedem Einzelfall als Entlehnung kenntlich gemacht habe; dass diese Dissertation noch keiner anderen Fakultät oder Universität zur Prüfung vorgelegen hat; dass sie - abgesehen von unten angegebenen Teilpublikationen - noch nicht veröffentlicht worden ist sowie, dass ich eine solche Veröffentlichung vor Abschluss des Promotionsverfahrens nicht vornehmen werde. Die Bestimmungen der Promotionsordnung sind mir bekannt. Die von mir vorgelegte Dissertation ist von Prof. Dr. Bülent Tezkan betreut worden.

Köln, 31.07.2017

Teilpublikationen

Langenbach, H. and Tezkan,B., 2016. *2D Cole-Cole Inversion of Time-Domain IP Data Measured in Krauthausen, Germany*, 4th International Workshop on Induced Polarization, Aarhus Denmark.